

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CALLAO
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA
ESCUELA PROFESIONAL DE INGENIERÍA QUÍMICA



**“MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN EN ASPEN HYSYS 11 PARA
LA OBTENCIÓN DE ACETATO MONÓMERO DE VINILO (VAM)
UTILIZANDO DISEÑO CONCEPTUAL DE PROCESOS”**

**TESIS PARA OPTAR EL TÍTULO PROFESIONAL DE
INGENIERO QUÍMICO**

Edward Alfredo, Yance Rojas

Callao, 2021

PERÚ

A handwritten signature in black ink, appearing to be the author's name, Edward Alfredo Yance Rojas.

A handwritten signature in blue ink, appearing to be the name of a reviewer or official.

HOJA DE REFERENCIA DEL JURADO Y APROBACIÓN

La presente tesis fue expuesta por el bachiller Yance Rojas, Edward Alfredo, ante el jurado de sustentación de tesis conformado por los siguientes Profesores Ordinarios:

Presidente: Dr. CARRASCO VENEGAS LUIS AMÉRICO

Secretario: Dr. CALDERÓN CRUZ JULIO CÉSAR

Vocal: Mg. REYNA SEGURA ANA MARÍA

Suplente: Mg. ROJAS ROJAS VICTORIA

Asesor: Mg. IPANAQUE MAZA CALIXTO

Tal como está asentado en el Libro N°1 Folio N°85 y Acta N°84 de Sustentación por la Modalidad de Tesis con Ciclo de Tesis, de fecha **VEINTIDÓS DE AGOSTO DEL 2021**, para optar el Título Profesional de Ingeniero Químico en la Modalidad de Tesis con Ciclo de Tesis, de conformidad establecido por el reglamento de Grados y Títulos aprobado por Resolución de Consejo Universitario N°245-2018-CU, del 30 de octubre del 2018.

DEDICATORIA

A mi familia, por todos los valores éticos y morales
inculcados, por estar siempre a nuestro lado
en cada paso de nuestras vidas brindándonos
la fortaleza a lo largo del camino.

A los amigos, por el soporte brindado en
la elaboración de este trabajo y
los momentos gratos.

Gracias por todo el apoyo.

AGRADECIMIENTO

Se hace extensivo el saludo correspondiente a la Facultad de Ingeniería Química de la Universidad Nacional del Callao, y al asesor Calixto Ipanaque Maza por la labor de asesoría correspondiente a lo largo del desarrollo de esta tesis durante la época de pandemia.

Adicionalmente, se hace llegar el reconocimiento debido a Hon Huin Chin & Petar Sabev Varbanov (Brno University of Technology, Republica Checa), Alexandra-Elena Plesu Popescu (Universidad de Barcelona, España) y a Stanislav Boldyryev (Tomsk Polytechnic University - Rusia), investigadores de la publicación *Thermodynamics-Based Process Sustainability Evaluation*, por las sugerencias realizadas para la realización de esta simulación.

ÍNDICE

TABLAS DE CONTENIDO	6
RESUMEN	10
ABSTRACT	11
INTRODUCCIÓN	12
I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	13
1.1. Descripción de la realidad problemática	13
1.2. Formulación del problema	14
1.2.1. Problema General	14
1.2.2. Problemas Específicos	14
1.3. Objetivos	14
1.3.1. Objetivo General	14
1.3.2. Objetivos Específicos	14
1.4. Limitantes de la Investigación	15
1.4.1. Teórica	15
1.4.2. Temporal	15
1.4.3. Espacial	15
II. MARCO TEÓRICO	16
2.1. Antecedentes	16
2.1.1. Antecedentes internacionales	16
2.1.2. Antecedentes nacionales	18

2.2.	Bases Teóricas	19
2.2.1.	Breve descripción de la síntesis de procesos químicos.....	19
2.2.2.	Modelo y modelamiento de procesos químicos.....	21
2.2.3.	Simulación aplicada a los procesos químicos	23
2.2.4.	Simulación utilizando Aspen Hysys.....	27
2.2.5.	Generalidades del acetato monómero de vinilo (VAM).....	29
2.2.6.	Rutas químicas para la obtención del acetato monómero de vinilo (VAM)	33
2.2.7.	Diseño conceptual de procesos químicos	35
2.2.8.	Ingeniería verde aplicada a la ingeniería de procesos.....	42
2.2.9.	Indicadores para la selección de la ruta química	44
2.3.	Conceptual.....	45
2.4.	Definición de términos básicos.....	47
III.	HIPÓTESIS Y VARIABLES	48
3.1.	Hipótesis	48
3.1.1.	Hipótesis general	48
3.1.2.	Hipótesis específicas.....	48
3.2.	Definición conceptual de variables	48
3.2.1.	Operacionalización de variables.....	49
IV.	DISEÑO METODOLÓGICO	50
4.1.	Tipo y diseño de investigación	50
4.2.	Método de investigación.....	50
4.3.	Población y muestra.....	51

4.4.	Lugar de estudio	51
4.5.	Técnicas e instrumentos para la recolección de la información	52
4.6.	Análisis y procesamiento de datos	52
V.	RESULTADOS.....	56
5.1.	Resultados descriptivos	56
5.1.1.	Selección de la ruta química	56
5.1.2.	Descarte de rutas químicas.....	56
5.1.3.	Aplicación de los indicadores de sostenibilidad de Narvárez.....	59
5.1.4.	Preliminares de la simulación en Aspen Hysys v11.....	62
5.1.5.	Metodología de Douglas para la simulación del proceso de	
	acetato monómero de vinilo usando diseño conceptual	66
5.1.6.	Evaluación de los equipos a simular en el proceso en la zona	
	de alimentación.....	79
5.1.7.	Evaluación de los equipos a simular en el proceso en la zona de	
	reacción	81
5.1.8.	Evaluación de los equipos a simular en el proceso en la zona de	
	separación de fases.....	81
5.1.9.	Evaluación de los equipos a simular en el proceso en la zona de	
	destilación.....	83
5.1.10.	Evaluación económica del proceso de acetato monómero de vinilo	
	obtenido	86
5.2.	Resultados inferenciales	90

5.3.	Otro tipo de resultados estadísticos, de acuerdo a la naturaleza del problema y la hipótesis.....	90
VI.	DISCUSIÓN DE RESULTADOS.....	91
6.1.	Contrastación y demostración de la hipótesis con los resultados	91
6.1.1.	Contrastación de la hipótesis general.....	91
6.1.2.	Contrastación de las hipótesis específicas.....	91
6.2.	Contrastación de los resultados con otros estudios similares.....	92
6.2.1.	Selección de la ruta química	92
6.2.2.	Metodología de Douglas para la simulación del proceso de acetato monómero de vinilo usando diseño conceptual	93
6.2.3.	Evaluación económica del proceso	103
6.3.	Responsabilidad ética de acuerdo a los reglamentos vigentes.....	104
VII.	CONCLUSIONES	105
VIII.	RECOMENDACIONES.....	106
IX.	REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	107
	ANEXOS	111
	ANEXO 1: Matriz de consistencia.....	112
	ANEXO 2: Consideraciones en el ingreso de data en Aspen Hysys 11	113
	ANEXO 3: Simulación propuesta en Aspen Hysys del acetato monómero de vinilo (VAM).....	116
	ANEXO 4: Datos de inicialización en la simulación	117
	ANEXO 5: Análisis de grados de libertad de los equipos del proceso	119
	ANEXO 6: Resultados de balance de materia del simulador Aspen Hysys	124

ANEXO 7: Resultados de composiciones del simulador Aspen Hysys125

TABLAS DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1	<i>Comparación entre simuladores de modo secuencial y orientados a ecuaciones.....</i>	26
Tabla 2	<i>Propiedades químicas del acetato monómero de vinilo (VAM).....</i>	30
Tabla 3	<i>Riesgos del acetato monómero de vinilo (VAM).....</i>	32
Tabla 4	<i>Ejemplos de problemas de diseño de productos.....</i>	38
Tabla 5	<i>Intervalos de indicadores de sostenibilidad.....</i>	44
Tabla 6	<i>Indicadores de seguridad química.....</i>	53
Tabla 7	<i>Indicadores de seguridad del proceso.....</i>	54
Tabla 8	<i>Indicadores ambientales.....</i>	54
Tabla 9	<i>Indicadores de salud ocupacional.....</i>	55
Tabla 10	<i>Comparativo de rutas químicas del VAM.....</i>	56
Tabla 11	<i>Aplicación de indicadores de seguridad química.....</i>	59
Tabla 12	<i>Aplicación de indicadores de seguridad de proceso.....</i>	60
Tabla 13	<i>Aplicación de los indicadores ambientales.....</i>	60
Tabla 14	<i>Aplicación de los índices de salud ocupacional.....</i>	61
Tabla 15	<i>Resumen de indicadores de Narváez.....</i>	62
Tabla 16	<i>Componentes a simular en Aspen Hysys.....</i>	63
Tabla 17	<i>Parámetros cinéticos de las reacciones para el acetato monómero de vinilo (VAM). 66</i>	66
Tabla 18	<i>Valor de transacciones en dólares americanos de acetato monómero de vinilo al Perú67</i>	67
Tabla 19	<i>Variables de entrada y salida para el proceso global.....</i>	69
Tabla 20	<i>Balace de materia global por componente.....</i>	71
Tabla 21	<i>Equipos de la zona de alimentación del proceso.....</i>	80
Tabla 22	<i>Equipos de la zona de reacción del proceso.....</i>	81
Tabla 23	<i>Equipos de la zona de separación de fases del proceso.....</i>	82
Tabla 24	<i>Equipos de la zona de destilación del proceso.....</i>	84
Tabla 25	<i>Comparación de requisitos vs producto simulado en Aspen Hysys.....</i>	85
Tabla 26	<i>Costos de materias primas y productos en el proceso.....</i>	86

Tabla 27	<i>Costo de servicios en el proceso</i>	87
Tabla 28	<i>Costos obtenidos para el proceso</i>	87
Tabla 29	<i>Costo de equipos en el proceso</i>	88
Tabla 30	<i>Resultados econométricos del proceso</i>	89
Tabla 31	<i>Evaluación multicriterio para la selección de ruta química</i>	92
Tabla 32	<i>Parámetros de equipos en la zona de alimentación</i>	95
Tabla 33	<i>Composición molar a la salida del reactor del proceso</i>	97
Tabla 34	<i>Parámetros de equipos en la zona de reacción</i>	98
Tabla 35	<i>Parámetros de equipos en la zona de separación de fases</i>	98
Tabla 36	<i>Inicialización de corrientes y composiciones de ingreso al proceso</i>	117
Tabla 37	<i>Consideraciones en la herramienta lógica Adjust</i>	118
Tabla 38	<i>Grados de libertad en intercambiadores de calor</i>	119
Tabla 39	<i>Grados de libertad en equipos de presión (bombas, compresores)</i>	119
Tabla 40	<i>Grados de libertad en el reactor</i>	120
Tabla 41	<i>Grados de libertad en el condensador</i>	121
Tabla 42	<i>Grados de libertad en el separador flash y en el degasificador</i>	121
Tabla 43	<i>Grados de libertad en el absorbedor</i>	122
Tabla 44	<i>Grados de libertad en la torre de destilación T-101</i>	122
Tabla 45	<i>Grados de libertad en la torre de destilación T-102</i>	123

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 <i>Curva de aprendizaje o sigmoidea</i>	20
Figura 2 <i>Modelo de simulación secuencial</i>	25
Figura 3 <i>Interfaz de simulación de Aspen Hysys</i>	28
Figura 4 <i>Estructura química del acetato monómero de vinilo (VAM)</i>	29
Figura 5 <i>Etapas del diseño conceptual</i>	36
Figura 6 <i>Etapas del diseño conceptual de procesos químicos</i>	41
Figura 7 <i>Niveles de jerarquía según la metodología de Douglas</i>	51
Figura 8 <i>Modelo termodinámico NRTL en Aspen Hysys</i>	64
Figura 9 <i>Balance global de componentes</i>	72
Figura 10 <i>Estructura general de reciclaje y reactores</i>	74
Figura 11 <i>Estructura general del sistema de separación</i>	78
Figura 12 <i>Zona de alimentación en el proceso</i>	80
Figura 13 <i>Zona de reacción del proceso</i>	81
Figura 14 <i>Zona de separación de fases del proceso</i>	82
Figura 15 <i>Zona de destilación del proceso</i>	84
Figura 16 <i>Flujo de caja del proceso</i>	89
Figura 17 <i>Propuesta de oxoacetilación usando metodología de Douglas</i>	94
Figura 18 <i>Perfiles de composición másica a lo largo del reactor</i>	96
Figura 19 <i>Proceso de oxoacetilación del ácido acético</i>	101
Figura 20 <i>Proceso propuesto de oxoacetilación por otros autores</i>	102
Figura 21 <i>Proceso de oxoacetilación en modo dinámico</i>	103
Figura 22 <i>Ingreso de componentes en Aspen Hysys 11</i>	113
Figura 23 <i>Ingreso de modelo termodinámico en Aspen Hysys 11</i>	113
Figura 24 <i>Selección de parámetros de interacción binaria del modelo termodinámico seleccionado</i>	114
Figura 25 <i>Selección de parámetros cinéticos para la reacción primaria del acetato monómero de vinilo (VAM)</i>	114

Figura 26 Selección de parámetros cinéticos para la reacción secundaria del acetato
monómero de vinilo (VAM)..... 115

RESUMEN

En el presente trabajo de investigación se propuso una metodología para el diseño conceptual del proceso industrial para la obtención del acetato monómero de vinilo, o VAM, por medio de modelamiento mediante el software Aspen Hysys 11, evaluando la mejor ruta química, el comportamiento del proceso en estado estacionario y estimar la rentabilidad económica preliminar.

Utilizando la metodología de Narváez se descartaron las rutas químicas más antiguas y se procedió a usar los indicadores de seguridad, salud y medio ambiente, obteniéndose la oxoacetilación de ácido acético, oxígeno y etileno. Posteriormente, teniendo en cuenta criterios fisicoquímicos, se estimaron los parámetros de diseño concernientes a la fase conceptual para los equipos propuestos con base en criterio ingenieril, en las tres zonas diseñadas para el proceso, las cuales son: zona de alimentación, zona de reacción y zona de separación, en la cual se logró obtener monómero acetato de vinilo con flujo de 1232 Kg/h, presión de 2 bar, temperatura de 87.26 °C y pureza de 99,92% y finalmente, se obtuvo que la TIR del proyecto es de 20,24%, con un VAN de 2,560,000.00, concluyendo que el proceso de simulación en fase conceptual es viable económicamente.

Palabras claves: Simulación, diseño conceptual, VAM, Aspen Hysys.

ABSTRACT

In the present work, a methodology was proposed for the conceptual design of the industrial process for obtaining vinyl acetate monomer, or VAM, by means of modeling using the Aspen Hysys 11 software, evaluating the best chemical route, the behavior of the process steady state and estimate the preliminary economic profitability.

Using the Narváez methodology, the oldest chemical routes were discarded and the safety, health and environment indicators were used, obtaining the oxoacetylation of acetic acid, oxygen and ethylene. Subsequently, taking into account physicochemical criteria, the design parameters concerning the conceptual phase for the proposed equipment were estimated based on engineering criteria, in the three zones designed for the process, which are: feeding zone, reaction zone and separation zone, in which it was possible to obtain vinyl acetate monomer with a flow of 1232 Kg/h, pressure of 2 bar, temperature of 87.26 °C and purity of 99.92% and finally, it was obtained that the IRR of the project is 20.24%, with a NPV of US\$ 2,560,000.00 concluding that the simulation process in the conceptual phase is economically viable.

Keywords: Simulation, conceptual design, VAM, Aspen Hysys.

INTRODUCCIÓN

La industria del plástico peruana da muestras de generar oportunidades de crecimiento de producción a nivel local e internacional (Collantes Diaz et al., 2017), sin embargo, la industria de productos intermedios para la elaboración de productos petroquímicos es aún escasa en dimensión, debido a la poca integración entre procesos químicos de alta complejidad desde la producción desde hidrocarburos como el petróleo, gas natural o carbón hasta lograr productos terminados con alto valor económico, lo que nos convierte en un mercado dependiente de insumos.

Adicional al problema de la dependencia de insumos para producción local, tradicionalmente el camino elegido para el diseño de un proceso químico a escala industrial es por medio de obtener el máximo beneficio económico y financiero, dejando de lado parámetros importantes de seguridad de planta y medio ambiente, que obligaron a la reformulación de muchos productos cuyos impactos ambientales han demostrado efectos nocivos para el planeta (Narváez, 2014). Muchas de las tecnologías actuales desde su concepción, utilizan mecanismos de selección para la ruta química que en la actualidad resultan en efectos nocivos atenuados, así como en una disminución de riesgos en la seguridad de planta, debido a las mejores condiciones de conceptualización al momento de tomar decisiones sobre cual tecnología presenta los mejores estudios.

En este trabajo se propuso una metodología del diseño conceptual del proceso industrial para la obtención del acetato monómero de vinilo (VAM), por medio de modelamiento mediante el software Aspen Hysys 11, determinando la ruta química más idónea, evaluar el comportamiento del proceso y determinar la rentabilidad económica preliminar.

I. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

1.1. Descripción de la realidad problemática

Los productos commodities generados por la industria petroquímica, tanto a nivel de consumo intermedio como productos finales, presentan una demanda creciente en países latinoamericanos como el Perú. En este sentido, nuestro país es un importador de bienes terminados como el acetato monómero de vinilo (VAM) y exportador de los excedentes de gas natural (el cual es principalmente metano y etano y posteriormente usados en complejos petroquímicos extranjeros) con los cuales se podría iniciar una industria petroquímica a nivel local con la capacidad de satisfacer la demanda interna del país, y lograr un posterior escalamiento para cubrir los diferentes mercados cercanos como Ecuador, Colombia o Chile.

Adicionalmente, se hace más relevante la tendencia en el diseño conceptual de procesos químicos hacia el viraje a nuevas técnicas que permitan escoger la mejor selección de ruta química que genere el menor impacto ambiental posible y a su vez ofrezca la mejor alternativa de seguridad en planta para el almacenaje y durante la operación.

En las últimas décadas, con el auge de mejores procesadores y sistemas computacionales, el desarrollar modelamientos mediante el uso de software especializado como Aspen Hysys, permite desarrollar los cálculos para el diseño de los procesos químicos a nivel industrial a fin de analizar, interpretar y evaluar los aspectos más relevantes de la operación con la finalidad de integrar con mayor flexibilidad a una ingeniería de detalle las primeras conclusiones obtenidas por medio de la metodología de diseño conceptual. No obstante, la difusión de estas herramientas a nivel local, aún sigue presentando dificultades debido al desconocimiento del uso apropiado de esta herramienta de apoyo informática.

1.2. Formulación del problema

1.2.1. Problema General

¿Cómo sería el diseño conceptual de procesos mediante modelamiento y simulación en Aspen Hysys 11 para la obtención de acetato monómero de vinilo?

1.2.2. Problemas Específicos

- a. ¿Cuál es la selección de ruta química más adecuada para la obtención de acetato monómero de vinilo (VAM)?
- b. ¿Cómo se comportan los parámetros obtenidos en nivel estacionario después del modelamiento en Aspen Hysys 11?
- c. ¿Cuál sería la rentabilidad económica preliminar al implementar el modelamiento obtenido por diseño conceptual?

1.3. Objetivos

1.3.1. Objetivo General

Obtener acetato monómero de vinilo (VAM) utilizando diseño conceptual de procesos mediante modelamiento y simulación en Aspen Hysys 11.

1.3.2. Objetivos Específicos

- a. Seleccionar la ruta química más adecuada para la obtención de acetato monómero de vinilo (VAM).
- b. Evaluar el comportamiento a nivel estacionario de los parámetros obtenidos por medio del modelamiento en Aspen Hysys 11.
- c. Estimar la rentabilidad económica preliminar del modelamiento obtenido por diseño conceptual en Aspen Hysys 11.

1.4. Limitantes de la Investigación

1.4.1. Teórica

La presente investigación no contempla limitantes de carácter teórico, debido a la accesibilidad de información bibliográfica por medios digitales.

1.4.2. Temporal

No existen limitantes temporales en la investigación debido a que la investigación se realiza dentro del periodo del ciclo de tesis propuesto.

1.4.3. Espacial

No existen limitantes espaciales, debido a que la simulación usando Aspen Hysys para la obtención de acetato monómero de vinilo (VAM) se realizó de manera remota y virtual con la licencia académica correspondiente.

II. MARCO TEÓRICO

2.1. Antecedentes

2.1.1. Antecedentes internacionales

Navarro y Hernández (2019) en su trabajo de grado “Diseño conceptual de un proceso industrial para obtención de monómero acetato de vinilo en Colombia”, plantearon como objetivo proponer un diseño conceptual de un proceso industrial para la obtención del monómero acetato de vinilo en Colombia por medio de la herramienta Aspen Plus V.10, en función de la demanda proyectada por los autores para cubrir la demanda colombiana y abastecer el mercado regional. Utilizando la metodología de Pahl y Beitz para el diseño conceptual, consideraron criterios fisicoquímicos, tecnológicos y económicos para la selección de la ruta química más óptima, así como los parámetros técnicos de relevancia para la obtención del producto y analizar la rentabilidad económica. Los resultados fueron que la mejor ruta fue la reacción en fase gaseosa implementando ácido acético, etileno, oxígeno y un catalizador de Paladio-Oro con bases alcalinas. Además, se estimaron los parámetros de diseño concernientes a la fase conceptual para los equipos propuestos con base en criterio ingenieril, en las áreas diseñadas para el proceso estimado en 190000 TM, las cuales son: zona de alimentación, zona de reacción y zona de separación, en la cual se logró obtener monómero acetato de vinilo con una pureza de 99,99% y finalmente, se obtuvo que la TIR del proyecto es de 17,03%, con un Payback de 5,87 años, concluyendo que el proceso en fase conceptual es viable económicamente.

Boixader et al. (2016) en su trabajo “Planta de producción de acetato de vinilo”, plantearon como objetivo diseñar una planta química para producir acetato de vinilo (con grado de polimerización) a partir de la oxoacetilación del etileno en fase gas. Se estudió

la viabilidad de la construcción y operación de la planta siguiendo el cumplimiento de la normativa y legislación española correspondiente a través del diseño y especificación detallado de todas las unidades de reacción y proceso de producción, purificación, control de procesos, seguridad e higiene, impactos medioambientales, layout tentativo y estudio de comisionado y operación de la planta. Los autores consideraron construir una planta para la producción de 70000 TM/año de acetato monómero de vinilo, localizada en la región de Barcelona, España. En función de las variables económicas determinadas por los autores, se considera un TIR de 5%, considerándose por debajo del promedio establecido para la rentabilidad económica aceptable.

Upadhye et al. (2011) en su trabajo de investigación “Conceptual Process Design: A Systematic Method to Evaluate and Develop Renewable Energy Technologies”, plantearon como objetivo evaluar de manera rápida procesos para el desarrollo de tecnologías de energía alternativas por medio del diseño conceptual de procesos. Los autores consideraron que la metodología propuesta por (Douglas, 1985) es una alternativa sistemática para la evaluación de procesos que pueden tomar muchos meses en completarse, adicional a los beneficios de la rentabilidad preliminar obtenida. Se realizó la investigación para la aplicación de esta metodología a una tecnología de conversión de biomasa. Se realizó la jerarquía de procesos correspondiente en 6 pasos, obteniéndose un beneficio económico rentable positivo por medio de potencial económico en cada nivel del proceso.

Luyben (2011) en su trabajo de investigación “Design and Control of a Modified Vinyl Acetate Monomer Process”, planteó como objetivo desarrollar un diagrama de flujo óptimo de manera económica basado en las condiciones previamente establecidas por

el mismo autor (Luyben & Tyréus, 1998), utilizando como metodología el diseño conceptual de procesos. El diseño obtenido en este trabajo obtuvo como resultado 18% más acetato monómero de vinilo que su predecesor, al modificar el diseño original obtenido del reactor duplicando las condiciones de altura, ingreso de reactivos y parámetros de operación del proceso en las áreas de reciclo. También se realizaron modificaciones al control de procesos para un mejor control de las perturbaciones que en el modelo original. Los resultados mostraron que aumentar la concentración de ácido acético y reducir las concentraciones de oxígeno al ingreso, mejoraron la selectividad de la reacción, en relación con los efectos estudiados en las variables de procesos seleccionadas por la publicación.

2.1.2. Antecedentes nacionales

Caballero y Takuda (2013) en su trabajo de grado Evaluación técnico-económica de una planta para producir acetato de vinilo monómero a partir del Gas de Camisea, presentó como objetivo diseñar un proceso industrial para la obtención de acetato monómero de vinilo (VAM), a partir del etileno, obtenido por craqueo a partir de los productos obtenidos en el Gas de Camisea en Perú. Se detalla el diseño de planta desde la caracterización del material base, proponiendo como ruta química a la reacción de ácido acético, etileno y aire para una cantidad proyectada de 20000 TM/año, con una conversión por paso de 60%. Se utilizó un catalizador simple de Pt para el estudio de esta tesis, por lo que los rendimientos cinéticos obtenidos fueron bajos en comparación con otras literaturas internacionales.

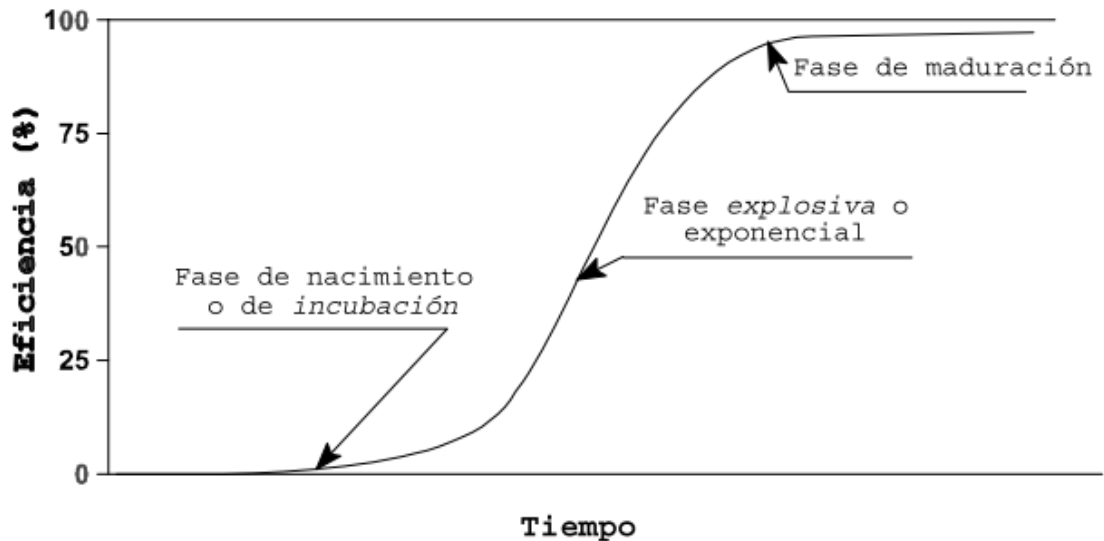
2.2. Bases Teóricas

2.2.1. Breve descripción de la síntesis de procesos químicos

(Scenna et al., 1999) define a la síntesis de procesos como una de las tareas más complejas y exigentes confrontada por el ingeniero químico. En un sentido más práctico, el uso de técnicas de síntesis de procesos fue introducido gradualmente como consecuencia de los avances sustanciales en la producción industrial y los procesos tecnológicos. La mayoría de los procesos químicos en uso en la actualidad surgieron desde mucho antes, cuando no existían métodos sistemáticos para la generación de las estructuras óptimas de los mismos (camino de reacción, redes de intercambio de sistemas de calor, sistemas integrados de proceso, trenes de separación, etc.), por lo que estas innovaciones se dieron de forma paulatina en el tiempo. Dado que en todo proceso químico existe la transformación fisicoquímica de materias primas en los productos deseados, se puede calcular el trabajo mínimo asociado (calculado termodinámicamente como un proceso ideal o reversible). Por lo tanto, se dispone de al menos un elemento de comparación, punto de referencia ideal u objetivo a alcanzar. Dicha magnitud sirve para comparar el consumo real de cualquier alternativa con respecto al trabajo mínimo. En este contexto, es interesante observar la evolución de diferentes procesos pertenecientes a diversos campos (no sólo a la industria química) que, mediante la incorporación de nuevos métodos y tecnología aplicados al diseño, han avanzado hacia alternativas más interesantes y próximas a la óptima, respondiendo a la curva de aprendizaje o sigmoidea como en la figura 1. Del análisis comparativo de estas curvas de aprendizaje, pueden obtenerse parámetros estimativos de la evolución de las tecnologías, tendencias de las olas de innovaciones básicas y de las aplicaciones tecnológicas, etc. Dentro de este contexto se puede influir que, en base a los datos históricos, se aproxima una aceleración en el ciclo de innovaciones y la frecuencia de los procesos de descubrimiento y sus aplicaciones tecnológicas.

Figura 1

Curva de aprendizaje o sigmoidea



Fuente: Scenna et al. (1999).

De acuerdo con (Márquez, 2003), es posible efectuar la síntesis o diseño de un nuevo proceso químico por medio de una metodología sistematizada que permita en forma simple identificar los posibles problemas de contaminación ambiental y de producción de residuos peligrosos en las etapas del desarrollo del proceso. Este procedimiento pone énfasis adicional en las decisiones que se deben tomar para llevar a cabo el diseño. Si se cambian las decisiones, entonces se generan alternativas de procesos. Por lo general, algunas de estas decisiones afectan las materias primas y los productos del proceso lo cual incide en algunos casos produciendo efectos adversos sobre el ambiente y los seres humanos. Por lo tanto, si es posible efectuar decisiones en las etapas de desarrollo inicial de un diseño que no produzcan problemas ambientales en etapas futuras.

Para los productos generados, la estrategia a realizar se focaliza en la reducción de los impactos a través de todo el ciclo de vida del producto, desde la extracción de las

materias primas hasta la última disposición del producto. La estrategia de Producción Limpia se logra alcanzar por medio de la aplicación de nuevas tecnologías, del mejoramiento de las existentes o por el simple cambio de actitudes. El uso de Tecnologías Limpias es diferente a lo tradicional, debido a que el pensamiento actual sobre los impactos ambientales se focaliza sobre qué hacer con los desechos y emisiones una vez generadas. La meta de conseguir una Producción Limpia es en primer lugar no generar residuos o desechos. La gran importancia de la Producción Limpia estriba en que a corto o largo plazo es el medio más efectivo y de menor costo para operar los procesos y desarrollar y producir nuevos productos. Los costos producidos por los desechos y las emisiones generadas, además del impacto negativo ambiental pueden ser evitados aplicando los conceptos de Tecnologías Limpias desde el comienzo. (Márquez, 2003).

2.2.2. Modelo y modelamiento de procesos químicos

(Moncada, 2011) señala que un modelo es una representación simplificada de aquellos aspectos de un proceso actual que está siendo investigado. Por ende, el flujo de información es dividido en dos etapas. En la primera etapa, un modelo es comparado versus el proceso real, y se toma como el adecuado si las diferencias son despreciables; en la segunda etapa, comparamos nuestras observaciones del proceso con las respuestas del modelo. Este procedimiento es denominado modelamiento.

De acuerdo con la definición anterior, Moncada (2011, pág.10) define dos clases de modelamientos:

Modelamiento Físico: En este caso el proceso de interés es reproducido en diferentes escalas y se analiza el efecto de las características físicas. El experimento es llevado a cabo directamente sobre el proceso real. Los datos experimentales son reducidos a

relaciones incluyendo grupos dimensionales hechos sobre varias combinaciones de cantidades físicas y dimensiones lineales. Con esta presentación dimensional, las relaciones encontradas pueden ser generalizadas a clases de eventos teniendo los mismos grupos dimensionales o similar criterio. Estos grupos dimensionales son derivados sobre la base de ecuaciones diferenciales o análisis dimensional.

El modelamiento físico consiste en buscar la misma o casi la misma similitud de criterio para el modelo y el proceso real. Como ya se ha notado antes, los procesos reales son modelados en una escala de crecimiento progresivo, con la dimensión longitudinal principal hecha en proporción (criterio de similitud). El principio de similitud es importante en el análisis de procesos determinísticos los cuales obedecen las leyes físicas, pero es difícil aplicar para el análisis de procesos probabilísticos incluyendo múltiples relaciones estocásticas entre los eventos (Moncada, 2011).

Modelamiento Matemático: El modelamiento matemático es el proceso de creación de una representación matemática de algún fenómeno en razón de conseguir un mejor entendimiento del fenómeno. Es un proceso en el cual se cambia la observación con el establecimiento simbólico. Durante la construcción de un modelo, el modelista deberá decidir qué factores serán relevantes para el fenómeno y cuáles podrán dejar de enfatizarse. En la construcción de un modelo matemático, un proceso real es reducido a sus bases esenciales, y el esquema resultante es descrito por un formulismo matemático seleccionado de acuerdo con la complejidad del proceso.

Es importante que un modelo deberá representar con suficiente exactitud las propiedades cuantitativas y cualitativas del fenómeno; en otras palabras, el modelo deberá adaptarse adecuadamente al proceso real. Para verificar esta necesidad, las observaciones hechas sobre el fenómeno deberán compararse con las predicciones derivadas del modelo bajo idénticas condiciones. Entonces un modelo matemático de un fenómeno – proceso – químico real es una descripción matemática combinando las

observaciones experimentales y estableciendo relaciones entre las variables de proceso. El objetivo final de un modelo matemático es la predicción del comportamiento del proceso y recomendar los debidos sistemas de control (Moncada, 2011).

Moncada también sugiere que es mejor agrupar los modelos en formas opuestas de agrupamiento. Para ello tenemos:

- Modelo determinista frente a probabilista.
- Modelo lineal frente a no lineal.
- Modelo en estado estacionario frente a estado no estacionario.
- Modelo en parámetro globalizado frente a parámetro distribuido.

La elección de un tipo particular de modelo matemático es determinada por las condiciones específicas bajo las que puede proceder un proceso dado. El objetivo principal del modelamiento y la simulación es para controlar un sistema o proceso dado.

2.2.3. Simulación aplicada a los procesos químicos

La simulación, según (Moncada, 2011) es un poderoso recurso para la solución de ecuaciones que describen los sistemas de ingeniería química. Las principales dificultades son:

- Solución de ecuaciones simultáneas algebraicas no lineales (usualmente realizadas por algún método iterativo).
- Integración numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias (usando ecuaciones discretas de diferencia finita para aproximar ecuaciones diferenciales continuas).

Se debe tener en cuenta la precisión y la estabilidad numérica de estas ecuaciones de aproximación, las cuales son afectadas por la ecuación de diferencia finita (o algoritmo de integración) usada. Muchos algoritmos han sido propuestos en la literatura. Algunos

algoritmos trabajan mejor (por ejemplo, rápidos y entonces no tan exactos para un grado de exactitud especificado) en algunos problemas que otros. No existe un algoritmo que trabaje mejor para todos los casos.

A lo largo de los años se han desarrollado un gran número de paquetes de simulación para procesos químicos. En teoría, estos paquetes de simulación relevan al ingeniero del conocimiento acerca de la integración numérica, facilitando al ingeniero el establecimiento y la solución de los problemas. Estos automáticamente monitorean errores en la estabilidad y ajustan el intervalo de integración o tamaño de paso para estar dentro de un criterio de precisión.

(Chaves et al., 2015) definen al simulador de procesos como aquel software usado para el modelamiento del comportamiento de un proceso químico en estado estacionario, por medio de la determinación de las presiones, temperaturas y flujos. En un sentido más amplio, también se aplican en el estudio del comportamiento dinámico, control de sistemas y respuesta a las perturbaciones inherentes a la operación. Estos simuladores pueden realizar dimensionamiento de equipos, estimación y análisis de costos, análisis de operatividad y optimización de procesos, en función a la cantidad de variables manipuladas. Entre los softwares de simulación comerciales y académicos más divulgados, tenemos a: Speed Up, Aspen Plus, Design II, Hysym, Aspen Hysys, Chemcad, Pro II, software libre como COCO o DWSIM.

(Reyna, 2017) define que la simulación por ordenador se refiere a unos métodos para estudiar los modelos de los sistemas reales mediante una evaluación numérica usando un software designado para imitar las características y operaciones del sistema. Desde un punto de vista práctico la simulación es el proceso de diseñar y crear un modelo computarizado de un sistema real propuesto para llevar a cabo experimentos numéricos, que nos proporcionarán un mejor entendimiento del comportamiento del sistema para

unas condiciones dadas. Aunque se puede utilizar para estudiar sistemas simples, el verdadero poder de esta técnica se aplica en el estudio de los sistemas complejos.

De acuerdo con (Carrasco, 2019), los simuladores de proceso se pueden clasificar en 3 tipos de acuerdo a la estrategia de simulación o cómo se aborda la solución para resolver el modelamiento matemático del proceso. Esto va en función de la complejidad del modelo y el modo de cálculo. Usualmente se consideran las subrutinas como vectores de inicialización a las corrientes de entrada/salida.

Simuladores de modo secuencial: En este tipo de simuladores, el modelo matemático de cada equipo de proceso (módulo), se resuelve después del modelo de módulo inmediato anterior, por lo que la solución es sucesiva desde las entradas hasta las salidas, como se muestra en la figura 2. Los ejemplos más comunes de este modo secuencial son Aspen Hysys, Chemcad y Pro II.

Figura 2

Modelo de simulación secuencial



Fuente: Carrasco (2019).

Simuladores orientados por ecuaciones: En este tipo de simuladores, se considera al proceso como un todo, y se forma un único modelo matemático (modelo de caja negra o modelo matemático global) con las ecuaciones de todos los modelos individuales. De esta forma, solo se resuelven las especificaciones con cero grados de libertad, resolviendo el modelado de forma automática. Los ejemplos más comunes de este modo son APMonitor, EMSO y gPROMS.

Simuladores híbridos: Este tipo de simuladores usan una herramienta mixta entre los dos tipos descritos anteriores. Se inicia con una estrategia secuencial y llevar los coeficientes lineales del modelo para encontrar una solución con una estrategia orientada por ecuaciones. Muchos de los simuladores secuenciales, aplican una estrategia híbrida en la actualidad, para alcanzar la convergencia en actualizaciones recientes.

En la tabla 1 se resumen las estrategias de modo secuencial y orientadas a ecuaciones.

Tabla 1

Comparación entre simuladores de modo secuencial y orientados a ecuaciones

Simuladores de modo secuencial	Simuladores orientados a ecuaciones
Son más fáciles de aprender a utilizar y más intuitivos gracias a la correspondencia entre el flujo de materia y la secuencia del cálculo.	Los métodos de solución usados son generales e independientes de los modelos matemáticos individuales.
Utilizan métodos de solución personalizados para cada modelo matemático, como sustitución directa o Wegstein. La convergencia es más sencilla de alcanzar.	Requieren inicialización de variables, debido a que pueden otorgar soluciones irreales en el campo físico. Los problemas de convergencia son difíciles de identificar y/o resolver, pero ofrecen alta velocidad de convergencia.
La mayoría de los simuladores comerciales son de este tipo.	Son más adecuados para resolver problemas de optimización y simulación dinámica.
No convergen con facilidad en simulaciones complejas o con reciclos.	Los reciclo no constituyen mayor problema en la convergencia del modelo, mientras se tengan las ecuaciones del modelo apropiadas.

Fuente: Carrasco (2019).

Aun cuando los programas de simulación son confiables en el uso, se hace necesario aplicar sólidos criterios de ingeniería para evitar el famoso concepto de programación “*Garbage In, Garbage Out*” (GIGO) (Carrasco, 2019):

- Seleccionar los modelos termodinámicos más apropiados para cada caso de estudio.
- Elegir el mejor método de solución para las ecuaciones de los modelos matemáticos.
- Especificar correctamente los parámetros de diseño y/o de operación de cada equipo a modelar.
- Evaluar y validar los resultados obtenidos.

2.2.4. Simulación utilizando Aspen Hysys

Aspen Hysys es un simulador de procesos en estado estacionario usado en la predicción del comportamiento de un proceso en una serie de operaciones unitarias, a través de las relaciones existentes entre ellas. Estas relaciones y conexiones determinan a través de los balances de masa y energía correspondientes, el equilibrio químico y las tasas de conversión en una reacción correspondientes (Chaves et al., 2015)

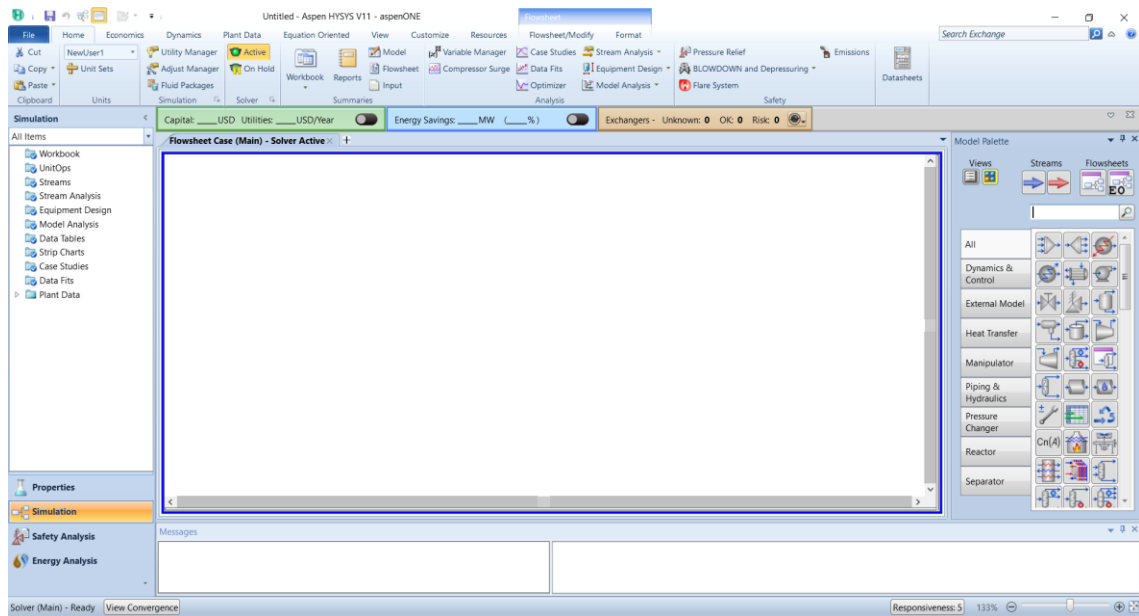
Entre las principales funciones de este simulador, podemos mencionar:

- Generación de figuras y tablas de proceso.
- Realización de análisis de sensibilidad y casos de estudio.
- Dimensionamiento y evaluación de equipos de proceso.
- Ajuste de data experimental.
- Análisis de propiedades de componentes puros y mezclas.
- Estudio de curvas de mapa residual.
- Optimización de procesos.
- Estimación y regresión de propiedades fisicoquímicas.

- Análisis dinámico de procesos.

Figura 3

Interfaz de simulación de Aspen Hysys



La metodología heurística utilizada para la realización de una simulación en Aspen Hysys incluye los siguientes pasos generales (Carrasco, 2019):

- Iniciar la interfaz de usuario de Aspen Hysys.
- Crear un nuevo caso de estudio.
- Crear las listas de componentes cuyas interacciones serán analizadas.
- Seleccionar el modelo termodinámico apropiado.
- Construir el diagrama de flujo del proceso a modelar y simular.
- Ingresar las especificaciones del proceso y las condiciones de operación de los equipos, corrientes y relaciones lógicas que ayuden a la convergencia de una solución adecuada.
- Generar un informe de resultados y/o casos de estudio adicionales.

La simulación en estado estacionario permite realizar un estudio de diferentes alternantes del proceso a evaluar, esto con la finalidad de diseñar o evaluar condiciones de operación mas adecuadas para un proceso real o planificar de forma económica el dimensionamiento a nivel piloto o a escala laboratorio.

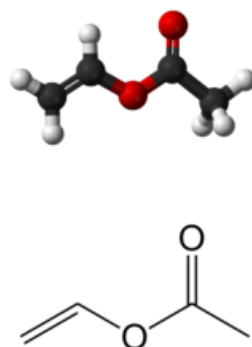
2.2.5. Generalidades del acetato monómero de vinilo (VAM)

El acetato monómero de vinilo, más conocido a nivel internacional como VAM por sus siglas en inglés, es un compuesto orgánico de formula química (CH₃COOCH=CH₂).

Entre sus principales características, descritas por (Vinyl Acetate Council, 2019) podemos resaltar que se trata de un líquido incoloro a temperatura ambiente, posee un olor característico dulce, placentero y frutado, el cual puede ser irritante en concentraciones altas, soluble en la mayoría de solventes orgánicos incluyendo los clorinados, pero no soluble en agua. Es fácilmente polimerizado con esteres de acrilato para la producción de polímeros de cadena larga. Es inhibido con hidroquinona.

Figura 4

Estructura química del acetato monómero de vinilo (VAM)



Fuente: Vinyl Acetate Council (2019).

Tabla 2

Propiedades químicas del acetato monómero de vinilo (VAM)

Propiedades	Descripción
Nombre químico	Acetato monómero de vinilo
Otros nombres asociados	Ácido acético etenil éster, Ácido acético vinil éster, monómero acetato de vinilo (VAM),
Nombre CAS	(108-05-4)
Formula química	C ₄ H ₆ O ₂
Masa molar	86.090 g·mol ⁻¹
Densidad	0.934 g/cm ³
Punto de fusión	-93.5 °C
Punto de ebullición	72.7 °C
Solubilidad en agua (20°C)	20 - 25 g/L

Fuente: DOW (2020)

Riesgos a la salud, seguridad y al medio ambiente

De acuerdo con (Vinyl Acetate Council, 2019), cuando se mezcla con aire a temperatura ambiente, puede formar un vapor inflamable. Sus vapores son más pesados que el aire y puede viajar una gran distancia a una fuente de ignición, como una llama o una chispa eléctrica.


En relación a la reactividad del acetato monómero de vinilo (VAM), puede ser inhibido con hidroquinona (Vinyl Acetate Council, 2019) Por otro lado, la exposición prolongada intensa al calor, a la luz del sol, la luz ultravioleta y/o la radiación podría causar la polimerización espontánea, al igual que la exposición a aminas, ácidos fuertes, oxidantes como peróxidos o iniciadores de polimerización. El calor y la presión generados durante dicha polimerización pueden romper los recipientes que no tengan

ventilación suficiente, ocasionando derrames de líquido, producción de vapor y posible incendio. El VAM se hidroliza en agua, no es una reacción violenta y por tanto no se considera una reacción peligrosa. Es irritante para las vías respiratorias, piel y ojos, el umbral de detección del olor es cerca de 0.5 ppm. Tiene una toxicidad baja por todos los medios de exposición, la dosis oral LD₅₀ en ratas es aproximadamente 2920 mg/Kg, la inhalación durante 4 horas LD₅₀ en ratas es aproximadamente 4000 ppm. No existen análisis médicos para cuantificar la dosis en el organismo en seres humanos, por lo que a la fecha se presume que es un potencial carcinógeno debido a la degradación en acetaldehído en el organismo.

En contacto con el aire, se degrada rápidamente por rutas fotoquímicas, la vida media en la atmosfera es de 0,6 días. Con respecto al vertimiento en fuentes de agua, este puede experimentar volatilización y de no ser así, experimenta hidrolisis, dando como resultado ácido acético y acetaldehído. La vida media hidrolítica del acetato de vinilo es aproximadamente de 7 días a un pH de 7 y 25°C, es moderadamente tóxico para las especies acuáticas, los valores agudos de toxicidad acuática fluctúan aproximadamente entre 12 a 18 mg/L para los peces de agua fresca, las algas y los invertebrados con un periodo de exposición de 48 a 96 horas. En el suelo, no se espera que se absorba en sedimentos, ya que también puede ocurrir volatilización del mismo o experimentar hidrolisis. Se biodegrada fácilmente mediante mecanismos anaeróbicos o aeróbicos, por tanto, no presenta bio-acumulación (Vinyl Acetate Council, 2019).

Tabla 3

Riesgos del acetato monómero de vinilo (VAM).

Propiedades	Descripción
Hoja de seguridad	ICSC 0347
NFPA 704 (Diamante)	
Punto de inflamación	-4° C (Copa cerrada) -8° C (Copa abierta)
Límites de inflamabilidad	LEL:2,6 – UEL:13,4
Temperatura de autoignición	460° C
Temperatura flash	-8 ° C

Fuente: Vinyl Acetate Council (2020)

Usos industriales del Acetato de Monómero Vinilo (VAM)

El acetato monómero de vinilo (VAM) es considerado un commodity y producto intermedio. Se polimeriza espontáneamente dando lugar al poliacetato de vinilo o acetato de polivinilo (PVA). De este polímero se derivan otros como el alcohol polivinílico y el copolímero poli (acetato de vinilo-co-alcohol vinílico) (PVOH).

Las principales aplicaciones del acetato de vinilo, según (Navarro & Hernández, 2019) como producto intermedio se mencionan a continuación:

- Plásticos (Películas y láminas plásticas).
- Adhesivos y pegamentos.
- Pinturas acrílicas solubles en agua.
- Revestimiento en plásticos en envases de industria alimentaria.
- Cristales de seguridad en industria vehicular.
- Fibras acrílicas.

- Industria papelera.
- Aditivos en aceites lubricantes.

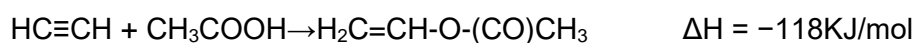
2.2.6. Rutas químicas para la obtención del acetato monómero de vinilo (VAM)

Para la obtención del acetato monómero de vinilo (VAM), se analizaron rutas químicas existentes en la literatura y a nivel industrial para la selección adecuada de aquella que ofrezca la ruta más adecuada en términos globales, en concordancia con la metodología de Narváez (2014)

A fines prácticos, no se incluyen rutas de integración de procesos petroquímicos ya existentes debido a la complejidad operacional y a la falta de sinergia en nuestro país de estos procesos, no obstante, se mencionan los casos de la oxidación de butano y del gas de síntesis, para la obtención de ácido acético y posterior integración con otros procesos industriales para la obtención de VAM. De acuerdo con (Bienewald et al., 2019) y (Le Berre et al., 2011) las tres rutas industriales más utilizadas son las expuestas a continuación.:

Ácido acético y acetileno

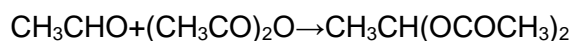
El proceso se basa en la reacción:



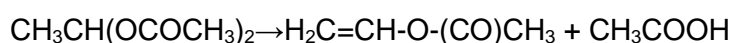
Las condiciones de operación son en fase gas a 170 – 250 ° C y $\text{Zn}(\text{OAc})_2$ como catalizador impregnado en carbón. La conversión por paso de acetileno es de 60-70% con selectividad del 93% para el acetileno y 99% de ácido acético. Los altos costos y la seguridad del acetileno lo vuelven un proceso menos competitivo con los años, por lo que ha sido desplazado en la actualidad con procesos similares.

Acetaldehído y anhídrido acético

Este proceso se da en dos etapas. La primera en donde el acetaldehído y el anhídrido acético forman diacetato etilideno en fase líquida a $-140\text{ }^{\circ}\text{C}$ con FeCl_3 como catalizador



En segundo paso, el compuesto intermedio se descompone a $120\text{ }^{\circ}\text{C}$ con catalizador ácido:



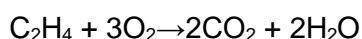
De acuerdo con (Le Berre et al., 2011), el proceso puede sostenerse completamente en materias primas renovables.

Ácido acético, etileno y oxígeno

En tecnologías antiguas, la reacción se llevaba a cabo a fase líquida a $110 - 130\text{ }^{\circ}\text{C}$ y $30 - 40\text{ bar}$ en presencia de un catalizador mixto de $\text{PdCl}_2/\text{CuCl}_2$, en donde la corrosión causaba problemas durante la operación.



Tecnologías más modernas operan el proceso en fase gaseosa con catalizadores basados en platino y con dopamiento del catalizador diverso (Navarro & Hernández, 2019). En estos procesos, una reacción secundaria no deseada es la combustión de etileno a CO_2 .



Con los catalizadores más modernos de Pd/Au , se ha logrado alcanzar selectividades de hasta 94%, en base al etileno y rendimientos de $98 - 99\%$ basados en ácido acético.

La remoción de CO₂, usualmente en lavado con una solución de KOH, afecta negativamente la operación en materia económica.

2.2.7. Diseño conceptual de procesos químicos

La actividad de diseñar es una de las tareas que evoca a la creatividad del ingeniero, con muchas posibilidades de inventar e imaginar; siendo la esencia de la ingeniería y la diferencia entre ella y las ciencias más formales. A lo largo de la historia, se ha intentado conceptualizar desde cierto punto de vista (ingenieril, filosófico, entre otras ramas) al problema del diseño. En relación a ello, una definición más comprensible de ello es partir desde la concepción de la idea de diseño como la actividad de desarrollo de la idea del producto, a partir de plantear y desarrollar las acciones consideradas necesarias para realizarla y hacerla plausible.

De acuerdo con (Narváez, 2014), queda establecida una clara diferencia entre diseño y desarrollo: quienes diseñan procesos crean diagramas de flujo y seleccionan condiciones de operación para producir un producto, de tal forma que obtengan alto rendimiento, conversión y selectividad, poco reciclo y bajo costo de producción; aquellos que hacen desarrollo ejercitan su creatividad en la formulación de experimentos y teorías para descubrir y explicar los mecanismos de las diferentes etapas de un proceso.

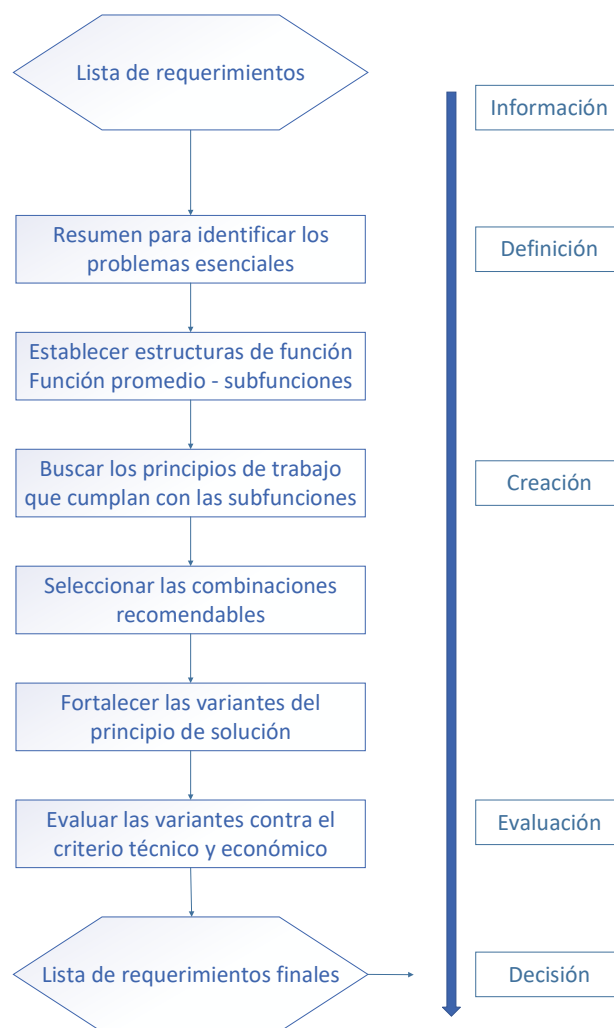
Entre las metodologías de diseños conceptual aplicada a procesos químicos podemos mencionar los trabajos realizados por (Rudd & Watson, 1968); (Douglas, 1985);(Dimian et al., 2019), cada uno de los cuales realiza un diseño basado en la heurística del proceso.

(Moran, 2019, pág. 25) sugiere que uno de las mejores metodologías para el diseño de plantas de proceso se da a través de la definición de diseño en un sentido más amplio, partiendo del trabajo de Pahl et al. (1977). Ellos definen al diseño conceptual como

“aquella parte del diseño de procesos en donde – al identificar los problemas esenciales por medio de la abstracción, estableciendo estructuras de función, buscando los principios de trabajo adecuados y combinándolos en una estructura funcional – el camino de solución básica es cimentado a través de la elaboración de un principio de solución”. Es por ello que el diseño conceptual especifica el principio de solución, en contraste con otras etapas más elaboradas o de distinta metodología de diseño, como se identifica en la figura 5.

Figura 5

Etapas del diseño conceptual



Fuente: Pahl y Beitz (2007)

El diseño conceptual según (Pahl et al., 2007), debe iniciar por la recopilación de información al proceso, para proceder con las definiciones formales de lo que se desea obtener. Durante estas etapas, es preferible establecer funciones o metodologías que nos permitan lograr lo definido (subrutinas, combinaciones recomendadas, principios de solución), para posteriormente llevar una evaluación a nivel preliminar basados en los principios técnicos y económicos del proceso. Con ello se pueden establecer etapas de diseño conceptual apropiadas para el proceso químico a desarrollar, considerando que la aproximación profesional nos permite elaborar los entregables a los proyectos para el desarrollo y obtención de un proceso químico.

Metodologías para el diseño conceptual

Se han investigado distintas aproximaciones y herramientas para el diseño de productos para generar alternativas de producto que cumplan con los requisitos tanto en ingeniería como del mercado, para seleccionar las mejores alternativas. A partir de lo propuesto por (Douglas, 1985; Pahl et al., 2007; Upadhye et al., 2011; Zhang et al., 2018), se pueden proponer algunas metodologías para el diseño conceptual. Estos se resumen brevemente en la Tabla 4.

Tabla 4*Ejemplos de problemas de diseño de productos*

Aproximaciones	Ejemplos	Ventajas	Desventajas
Experimental	Prueba y error. Diseño de experimentos.	Puede ser aplicado sin ninguna teoría o conocimiento. Llevan a menudo a un producto confiable y seguro.	Oportunidades de prueba limitada (se pueden perder mejores productos). Alto consumo de tiempo. Desperdicio de materiales.
Bases de datos	NIST ICAS	Las propiedades son confiables. Rápida generación de candidatos.	No se citan todas las moléculas en las bases de datos. Pueden faltar propiedades en las bases de datos.
Heurísticas	Douglas (1985) Diseño de Tam et al (2016) Diseño de Wilbowo & Ng (2001)	A menudo llevan a productos confiables y seguros. Proveen soluciones relativamente económicas y rápidas. Aplicación fácil conociendo las reglas.	Se puede omitir un mejor producto. Se necesita experiencia, visión y conocimiento del proceso. Válido dentro de un contexto limitado de procesos. Pueden contradecirse algunas reglas.
Aproximaciones basadas en el modelo	Diseño asistido por computadora (CAMD) por Harper & Gani (2000) Dinámica molecular por Sharma et al. (2016)	Se puede alcanzar una solución global óptima. No hay necesidad de conocimiento profundo una vez desarrollado el modelo.	El tamaño y complejidad del modelo matemático (especialmente productos complejos). No se comprenden muchos fenómenos fisicoquímicos

Aproximaciones	Ejemplos	Ventajas	Desventajas
		Puede ser aplicado a toda clase de problemas de diseño de producto.	ocurriendo (carencia de modelos). Falta de modelos relevantes para algunos productos. Errores del modelo de propiedades.

Fuente: Zhang et al. (2018)

Según (Zhang et al., 2018), los productos químicos han sido tradicionalmente diseñados y desarrollados a través de heurísticas y aproximaciones experimentales. Las metodologías heurísticas son de este modo más relevantes para productos ya estructurados. El mejor ejemplo es el estudio de (Douglas, 1985) en diseño de procesos, el cual logro demostrar que esta técnica provee de un marco adecuado para el diseño de procesos ya estructurados en la industria, así como generar alternativas de parámetros ingenieriles.

Los principios de solución basados al diseño de procesos industriales en muchas ocasiones, se basan en métodos tradicionales que no contemplan respuestas en el caso de requerir optimizaciones en el diseño original, o aquellas que requieran cambios tecnológicos ya sea por descubrimiento o necesidad del proceso, lo que conlleva a incrementar los costos a futuro durante la vida útil del proyecto de planta, inicialmente establecido. En la actualidad los proyectos presentan un dinamismo de carácter más ágil, lo que demuestra la articulación de proyectos durante la fase de Front-End Engineering (FEED), en las cuales los diseños conceptuales de procesos industriales adquieren un rango de condiciones de trabajo dinámico, en contraste con el estado estacionario en el que usualmente son realizadas.

(Navarro & Hernández, 2019) definen que “diseñar parte de una necesidad y a partir de ella se debe clarificar la tarea, e involucra identificar la demanda básica del mercado en

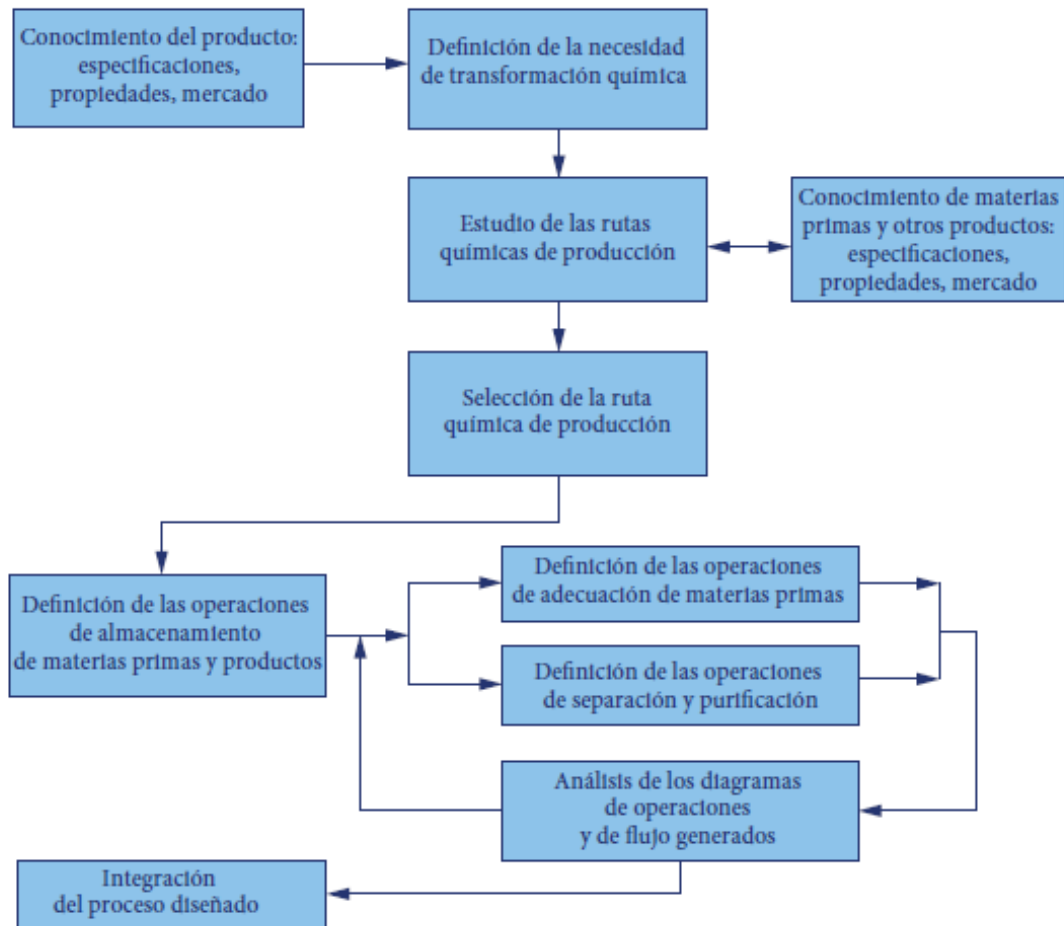
cuanto al producto de interés, las tendencias más representativas del mercado que se relacionan con el comportamiento de la demanda, los requisitos técnicos que debe cumplir el producto y la determinación de los volúmenes de producción y a partir de ello”. Una de las metodologías aplicadas en el desarrollo de esta investigación, será aplicar parte del trabajo propuesto por (Narváez, 2014), donde el proceso de conceptualizar el proceso químico parte de establecer todas las etapas para convertir las materias primas en productos que cumplan las condiciones de especificación de acuerdo a los requerimientos del proceso y/o estén de acuerdo a alguna norma de diseño correspondiente (ASTM, 2013).

Si bien el proceso de diseño conceptual se entiende por ser netamente creativo, también está sujeto a las restricciones de carácter fisicoquímico, económica, social y ambiental. Este proceso no nos inhibe de la búsqueda constante de información del producto sobre las propiedades del producto a obtener, sus características de toxicidad y potencial daño al ser humano y a los ecosistemas, así como una descripción del comportamiento económico de manera conceptual. A continuación, se procede con la identificación de las posibles rutas químicas para ejecutar la transformación en el producto deseado. Al identificar las rutas químicas surgen las materias primas de las que puede partirse, así como los demás productos que se generarán en el proceso. Se escogerá el mejor diseño, que evite los impactos potenciales (a nivel de salud y seguridad) en vez de controlarlos.

(Narváez, 2014) plantea que “el conocimiento profundo de esas rutas y de las propiedades de los compuestos que participan en ellas, permite generar la información necesaria para plantear condiciones de la reacción y para calcular un conjunto de indicadores que ayuda a la selección de la ruta que se implementará durante el proceso en diseño”.

Figura 6

Etapas del diseño conceptual de procesos químicos



Fuente: Narváez (2014)

Como se muestra en la figura 6, una vez definida la ruta química, se deberá definir las condiciones de almacenamiento y las operaciones de adecuación de materias primas para llevarlas a las condiciones de reacción. La aplicación del conocimiento, tales como las propuestas por el conocimiento de las heurísticas aplicadas por Douglas (1985) y de una metodología de síntesis de operaciones de separación y purificación permiten explorar posibles etapas de proceso para llevar la mezcla que sale de la etapa de reacción a las condiciones de almacenamiento de los productos, cumpliendo con las

especificaciones previamente establecidas. Finalmente, se analizan las alternativas de proceso propuestas y se procede a su integración para el modelamiento de los equipos, de acuerdo a la literatura que se considere correspondiente durante el desarrollo de la investigación.

El proceso de diseño conceptual aplicado a los procesos químicos culmina con una evaluación de beneficio económico preliminar estimada, de modo de estimar el diseño hacia etapas posteriores de diseño (detallado, mecánico, instrumental) de considerarse favorable.

2.2.8. Ingeniería verde aplicada a la ingeniería de procesos

De acuerdo con (Narváez, 2014), desde la era de la Revolución Industrial, la humanidad ha experimentado cambios sustanciales en el cambio de las actividades humanas, las cuales han generado una demanda sostenida a lo largo de los años. Esta generación de productos para satisfacer tal demanda, ha causado efectos a nivel de catástrofe en el medio ambiente por lo menos desde hace 150 años hacia el pasado, lo que ha incrementado la preocupación en organismos mundiales como la Organización de las Naciones Unidas (ONU) respecto al impacto de la industrialización sobre la salud humana y a los ecosistemas – citando al objetivo 7 de desarrollo del milenio, y posteriormente disgregado en objetivos hacia el año 2030 - haciendo énfasis en países en desarrollo como el Perú.

Es en este sentido que la rentabilidad de un producto, proceso o planta química, no puede restringirse solamente al beneficio económico, debiendo incluir la sostenibilidad ambiental y la solidaridad social. A lo largo de la década presente, si bien existe un acuerdo en la mejora de la sostenibilidad en la sociedad, no se presenta el mismo consenso en la forma de lograr esto en la ingeniería de procesos – donde la ingeniería química cumple un rol de diseñar procesos sostenibles – a nivel mundial.

Se propuso la aplicación de la ingeniería verde aplicado al diseño conceptual tradicional, aplicando la conceptualización de la ingeniería verde. En este sentido, Narváez (2014) define a la ingeniería verde como “la comercialización y el uso de procesos y productos que son factibles económicamente, mientras reducen la generación de polución en la fuente y los riesgos para la salud humana y el medio ambiente”. Adicionalmente, ofrece los siguientes principios:

- Desarrollar la ingeniería de procesos y productos de manera integral, usar el análisis de sistemas e integrar las herramientas de evaluación de impacto ambiental.
- Conservar y mejorar los ecosistemas naturales mientras se protege la salud humana y el bienestar.
- Pensar en el ciclo de vida en todas las actividades de ingeniería
- Asegurarse de que las entradas y salidas de materia y energía sean inherentemente seguras y tan benéficas como sea posible.
- Minimizar el agotamiento de los recursos naturales.
- Prevenir el desperdicio.
- Desarrollar y aplicar soluciones de ingeniería, con conocimiento de la geografía, idiosincrasia y cultura local.
- Crear soluciones de ingeniería más allá de las tecnologías actuales o dominantes; mejorar, innovar e inventar (tecnologías) para lograr la sostenibilidad.
- Fomentar la participación activa de las comunidades y de las partes interesadas en el desarrollo de soluciones de ingeniería.

2.2.9. Indicadores para la selección de la ruta química

Se propuso la metodología aplicada a la selección de la ruta química al diseño de procesos por (Narváez, 2014), basado en el trabajo de diversos autores para el manejo de los indicadores de sostenibilidad..

Tabla 5

Intervalos de indicadores de sostenibilidad

Aspecto	Indicadores	Intervalo típico
Seguridad química	Explosividad (%)	0 – 100
	Reactividad	0 – 4
	Inflamabilidad	0 – 4
Seguridad del proceso	Temperatura (°C)	25 – 500
	Presión (atm)	1 – 60
	Conversión (%)	0 – 100
	Rendimiento (%)	0 – 100
	Calor de reacción (KJ/mol)	(-600) – (+600)
Ambientales	Origen renovable	0 – 1
	GWP (potencial de calentamiento global)	1 – 300
	ODP (potencial de ozono)	-
	PCOP (potencial de oxidación fotoquímica)	0.1 – 1
	AP (potencial de lluvia acida)	0.5 – 2
	FBC (factor de bioconcentración)	0 – 2000
	DP (degradabilidad)	1 – 20
	AATP (L/mg) (toxicidad acuática aguda)	0.0125 – 0.1
	CATP (L/mg) (toxicidad acuática crónica)	0.0125 – 0.1

Aspecto	Indicadores	Intervalo típico
Salud ocupacional	HTPI (kg/mg) (potencial de dosis letal)	$2.5 \cdot 10^{-4} - 3.3 \cdot 10^{-3}$
	HTEPE (m ³ /kg) (potencial de dosis en limite umbral)	0.014 – 0.1
	Toxicidad	0 - 4

Fuente: Narváez (2014)

2.3. Conceptual

Muchas de los aspectos relacionados en esta investigación, consideran relevante la aplicación del modelamiento y la simulación de procesos químicos por medio del diseño conceptual. La importancia de esto radica en la difusión de estas técnicas computacionales a nivel nacional, así como el desarrollo de metodologías aplicables para el diseño de procesos químicos más sostenibles en el tiempo.

A partir de las bases teóricas expuestas, se puede expresar una propuesta adicional para la obtención de una ruta química que ofrezca la mejor alternativa en términos de seguridad química, seguridad del proceso, salud ocupacional, y ambientales, mediante los rangos de intervalos típicos encontrados en la literatura. Debido a que se expresó inicialmente que los aspectos económicos son la principal fuente de decisión en muchos procesos químicos, se optó por desarrollar esta alternativa que considere otros aspectos de selección alternativos a la rentabilidad primaria, considerando los costos de los productos y los reactivos.

Una vez seleccionada la ruta química más adecuada para la obtención del acetato monómero de vinilo (VAM), se propone la metodología de Douglas a partir de 5 niveles para el desarrollo de los equipos a seleccionar en el simulador de procesos. El modelamiento y la simulación son dos procesos sinérgicos, que parten del mismo criterio

expuesto, la expresión en términos matemáticos que se asemeje a los modelos usados en plantas reales de operación, de modo que estos sean relevantes a futuras investigaciones de optimización de procesos químicos. En este sentido, el modelamiento matemático permite la construcción a partir de los fenómenos físicos y químicos observados, relaciones entre variables conocidas a fin de predecir un proceso y apuntar a la descripción teórica y aplicada de estos en detalle. El aspecto de simulación apunta a desarrollar de mejor manera los algoritmos para desarrollar las operaciones necesarias para resolver el sistema de ecuaciones, relaciones matemáticas y restricciones operativas obtenidas a partir del modelamiento matemático, siendo esta operación importante en la descripción de sistemas complejos (sistemas con reacción, destilación, operaciones con reciclaje) o como balances de materia, energía, entalpía y entropía (mejor conocido en idioma inglés como *MESH equations*).

Al momento de aplicar la metodología de Douglas, se tomo en cuenta las preguntas sugeridas para el modelamiento preliminar de acuerdo a cada etapa del proceso, las cuales fueron aplicadas en el simulador de procesos Aspen Hysys v11. Los parámetros de los procesos para cada equipo se toman de acuerdo a lo descrito y sugerido en la literatura de plantas reales, por lo que el modelo propuesto debe cumplir adecuadamente con lo descrito por otros autores con aproximaciones similares, por lo que se comprueba la concordancia de lo obtenido por la simulación.

La aplicación de la simulación concluye con la rentabilidad preliminar por medio de dos parámetros propuestos por esta investigación: El valor actual neto (VAN) y la tasa interna de retorno (TIR), valores útiles para la evaluar la rentabilidad en operaciones de procesos químicos. Los costos se obtienen a partir de la demanda de cada equipo a partir de los parámetros definidos en el simulador, mientras que otros tuvieron que ser definidos a fin de ayudar a la evaluación de la rentabilidad. Con este criterio quedaría

comprobado que el modelo de simulación propuesto a partir de la ruta química obtenida, permitió obtener una operación con rentabilidad económica.

2.4. Definición de términos básicos

Aspen Hysys: Simulador comercial de operaciones de procesos químicos, desarrollado por AspenTech, usado para el modelamiento matemático de procesos químicos, variando en complejidad desde operaciones unitarias hasta complejos petroquímicos conexos, aplicando modelamientos en estado estacionario y dinámico de ser requerido.

Catalizador: Es una sustancia que se puede añadir a una reacción para aumentar la velocidad de reacción sin ser consumida en el proceso. Los catalizadores aceleran una reacción al disminuir la energía de activación o al cambiar el mecanismo de reacción (Navarro & Hernández, 2019)

Diseño Conceptual. Fase de diseño en la cual se plantea el problema esencial, se establecen las estructuras y subestructuras funcionales que solucionan el problema. (Navarro & Hernandez, 2019)

Simulación asistida por computadora: Programa informático o una red de ordenadores cuyo fin es crear una simulación de un modelo abstracto de un determinado sistema.

Variable estocástica. Variable cuyos efectos de la actividad se comportan de manera aleatoria en distintas salidas, contrariamente a una variable determinística (Reyna,2020).

III. HIPÓTESIS Y VARIABLES

3.1. Hipótesis

3.1.1. Hipótesis general

El diseño conceptual para la síntesis del acetato monómero de vinilo (VAM), se obtiene por medio de la metodología de Douglas y el modelamiento con Aspen Hysys 11

3.1.2. Hipótesis específicas

- a. La metodología propuesta permite seleccionar la mejor ruta química para la síntesis de acetato monómero de vinilo (VAM).
- b. El comportamiento a nivel estacionario es concordante de acuerdo a los parámetros obtenidos de flujo, presión, temperatura y composición por medio del modelamiento en Aspen Hysys 11.
- c. Es factible obtener rentabilidad económica positiva del modelamiento obtenido por diseño conceptual en Aspen Hysys 11.

3.2. Definición conceptual de variables

$$Y=f(X_1,X_2,X_3)$$

Y= Diseño conceptual para la síntesis del VAM

X₁= Metodología para síntesis de acetato monómero de vinilo (VAM).

X₂= Comportamiento de parámetros en la simulación.

X₃= Rentabilidad económica del modelamiento obtenido.

3.2.1. Operacionalización de variables

Variable	Dimensiones	Indicadores	Índices	Métodos	Técnicas
Metodología para síntesis de acetato de vinilo (X ₁)	Características metodológicas	-Seguridad química. -Seguridad del proceso. -Ambiental. -Salud ocupacional.	Rangos de intervalo típicos.	Selección de ruta química usando ecuaciones para indicadores de sostenibilidad de Narváez	Evaluación ponderativa.
Comportamiento de parámetros en la simulación (X ₂)	-Flujo -Presión -Temperatura	-Kg/h -bar -°C	De acuerdo al equipo a evaluar	Metodología heurística de Douglas.	Técnicas computacionales de simulación usando Aspen Hysys.
Rentabilidad económica del modelamiento (X ₃)	-VAN -TIR	No aplica	No aplica	Evaluación económica preliminar.	Evaluación de variables econométricas.

IV. DISEÑO METODOLÓGICO

4.1. Tipo y diseño de investigación

La investigación propuesta fue de tipo descriptivo, al tratarse de un diseño conceptual para la producción del proceso de acetato monómero de vinilo (VAM). Se ejecutó una observación a la metodología con la finalidad de alentar a futuras ampliaciones de la técnica utilizada o a estudios de mayor alcance científico.

La investigación usó un diseño no experimental, debido al uso de las fuentes de recolección de datos como libros, publicaciones indexadas, etc, en vez de utilizar datos de planta de forma explícita. Este diseño presentó la robustez suficiente para el diseño conceptual propuesto por esta investigación.

Este tipo de diseño propuesto fue aplicado y cuantitativo, tomando como partida condiciones de herramienta secuencial por módulos, donde se deben realizar modificaciones para luego utilizar las herramientas idóneas en la solución del problema a partir de nuevos escenarios planteados.

4.2. Método de investigación

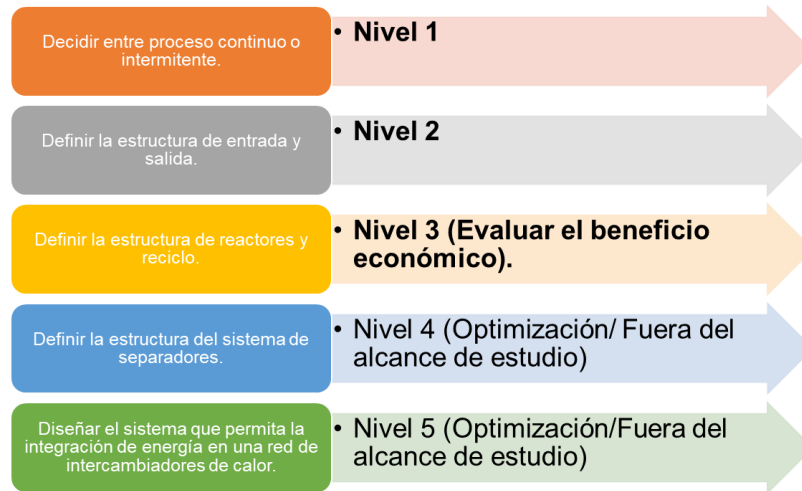
Debido al tipo de investigación, se propuso el método de investigación analítico ponderativo propuesto por Narváez (2014) para la selección de la ruta química, al separar el problema en distintas partes para el análisis consecutivo de acuerdo a la metodología presentada, buscando así explicar el comportamiento del sistema diseñado para ofrecer una solución al problema de investigación planteado.

Para evaluar el comportamiento del proceso por medio de la simulación, se propone el método heurístico de Douglas (1985), también citada por (Upadhye et al., 2011), considerando la metodología hasta el alcance de los equipos de separación, en donde se procederá a la evaluación económica. La integración de los equipos de separación y

de a nivel de integración de proceso se consideran optimizaciones dentro de la heurística, por lo que no serán consideradas dentro del alcance de esta investigación.

Figura 7

Niveles de jerarquía según la metodología de Douglas



Fuente: Elaboración propia en base a metodología de Douglas (1985)

4.3. Población y muestra

Se planteó como población a todos los procesos para la síntesis de acetato monómero de vinilo, a partir de la información bibliográfica. La muestra a estudiar fue el modelamiento obtenido en Aspen Hysys a partir de la metodología propuesta.

4.4. Lugar de estudio

Los estudios exploratorios se realizaron en forma virtual, utilizando el software de modelamiento Aspen Hysys 11 usando la modalidad remota, con la licencia estudiantil, necesaria para el modelamiento.

4.5. Técnicas e instrumentos para la recolección de la información

Debido al carácter tecnológico de esta tesis, se usaron como medios de cálculo una computadora con licencia académica de Aspen Hysys.

Se plantearon dos fuentes principales de recolección de información:

Fuentes primarias: Aquellas obtenidas a partir de la información proporcionada por el software de modelamiento Aspen Hysys 11, debido a contar con una base sólida y actualizada de información termodinámica (entre las que mencionamos a NIST y Dechema) para la predicción del comportamiento durante el proceso en fase estacionaria.

Fuentes secundarias: Aquellas obtenidas a partir de datos encontrados en bibliografía relacionada a procesos industriales y estudios económicos desarrollados por empresas relacionadas al sector, utilizadas para los parámetros de inicialización del modelo determinado por la selección de ruta química, tomados de acuerdo a la información ofrecida por la especificación del producto terminado.

4.6. Análisis y procesamiento de datos

Para la selección de la ruta química, se planteará realizar un estudio de datos de carácter de decisión ponderativa cuantitativa, considerando los criterios propuestos de por (Narvaes, 2014), basado en el trabajo de diversos autores para el manejo de los indicadores, como se indican en las tablas 6 – 9.

En el modelamiento del proceso, según (Dimian et al., 2019) se adecuó la información bibliográfica en relación a la ruta química seleccionada en el paso anterior, considerando los datos de demanda bibliográficos como punto inicial para el análisis conceptual. Se hizo uso de herramientas lógicas, de requerirse en la simulación como herramientas del tipo Adjust o Set, así como análisis de sensibilidad para la evaluación de los equipos

principales y herramientas de análisis económico desde el mismo software de modelamiento para el análisis económico de los costos de capital, utilitarios y valor presente neto y tasa de retorno económico, evaluando el beneficio económico propuesto por la metodología.

Debido al uso de técnicas de simulación de procesos químicos en el desarrollo de esta investigación, se presentan reportes de los balances de materia, energía y económicos obtenidos del modelamiento donde se refleje el comportamiento de las variables definidas.

Tabla 6

Indicadores de seguridad química

Aspecto	Indicadores	Ecuación de normalización
Seguridad química	Explosividad (%)	$\overline{Exr} = \frac{\sum_{c=1}^c Ex_c}{100c}$
	Reactividad	$\overline{Rxr} = \frac{\sum_{c=1}^c Rx_c}{4c}$
	Inflamabilidad	$\overline{Fr} = \frac{\sum_{c=1}^c F_c}{4c}$

Fuente: Narváez (2014)

Tabla 7*Indicadores de seguridad del proceso*

Aspecto	Indicadores	Ecuación de normalización
Seguridad del proceso	Temperatura (°C)	$\bar{T}_r = 1 - e^{-(aT-b)}$
	Presión (atm)	$\bar{P}_r = 1 - e^{-(aP-1)}$
	Conversión (%)	$\bar{X}_r = \frac{100 - X}{100}$
	Rendimiento (%)	$\bar{Y}_r = \frac{100 - Y}{100}$
	Calor de reacción (KJ/mol)	$\overline{\Delta H}_r = 1 - \frac{1}{1 + 4.45 \times 10^{-5} \Delta H}$

Fuente: Narváez (2014)

Nota 1: Para $T > 25^\circ\text{C}$, $a=0.005$, $b=0.125$. Otros valores con $a=0.0020$, $b=0.5$

Nota 2: Para $P > 1\text{atm}$ $a=0.03$. Otros valores con $a=5.00$

Tabla 8*Indicadores ambientales*

Aspecto	Indicadores	Ecuación de normalización
Ambientales	GWP (potencial de calentamiento global)	$\overline{\varphi}_{r,l} = \frac{\sum_{c=1}^C \text{Potencial}_{c,l}}{[(\text{Potencial})_r]_l + 2\sigma_l] \times C}$
	ODP (potencial de ozono)	
	PCOP (potencial oxidación fotoquímica)	
	AP (potencial de lluvia acida)	
	FBC (factor de bioconcentración)	
	DP (degradabilidad)	
	AATP (L/mg) (toxicidad acuática aguda)	

Aspecto	Indicadores	Ecuación de normalización
	CATP (L/mg) (toxicidad acuática crónica)	$\overline{\varphi_{r,l}} = 1 - \frac{\sum_{c=1}^C Potencial_{c,l}}{[(Potencial)_r]_l + 2\sigma_l] \times C}$

Fuente: Narváez (2014)

Tabla 9

Indicadores de salud ocupacional

Aspecto	Indicadores	Intervalo típico
Salud ocupacional	HTPI (kg/mg) (potencial de dosis letal)	$\overline{\varphi_{r,l}}$
	HTPE (m3/kg) (potencial de dosis en limite umbral)	$= 1 - \frac{\sum_{c=1}^C Potencial_{c,l}}{[(Potencial)_r]_l + 2\sigma_l] \times C}$
	Toxicidad	$\bar{T}_{xr} = \frac{\sum_{c=1}^C T_x}{4c}$

Fuente: Narváez (2014)

V. RESULTADOS

5.1. Resultados descriptivos

5.1.1. Selección de la ruta química

La metodología propuesta por Narváez (2014), nos permite realizar un análisis a las especificaciones del acetato monómero de vinilo (VAM), criterios fisicoquímicos, técnicos, económicos y de seguridad y salud en la industria de procesos químicos.

5.1.2. Descarte de rutas químicas

El primer paso fue el mapeo de todas las rutas químicas posibles para la síntesis del VAM, los cuales fueron detallados en las bases teóricas de esta investigación.

El segundo paso consistió en eliminar cualitativamente aquellas tecnologías que carecen de vigencia a nivel mundial, ya sea debido a la presencia de compuestos con propiedades altamente nocivas o con características de seguridad muy peligrosas.

Tabla 10

Comparativo de rutas químicas del VAM

Ruta química	Catalizador	Ventajas	Desventajas
Ácido acético + Acetileno (fase líquida)	Sales de mercurio (fase líquida).	Alta conversión y selectividad de producto.	Almacenaje de producto (el cual no debe sobrepasar 75°C). Altos costos de materias primas.
Ácido acético + Acetileno (fase gas)	Sales de zinc (fase gaseosa).	No se produce la oxidación del etileno.	Altas presiones de operación.

Ruta química	Catalizador	Ventajas	Desventajas
		Alta viabilidad industrial en fase gaseosa (20% de producción mundial).	
Anhidrido acético + acetaldehído	Cloruro de hierro (III).	Genera productos intermedios (etilendiacetato). Materias primas explosivas (por encima de 49° C).	Valor agregado muy bajo para el VAM. Requiere productos peligrosos como el ácido toluensulfónico para catalizar. Tecnología obsoleta a nivel internacional (última planta en México).
Acetato de metilo + Monóxido de carbono + Hidrógeno	Sales de rodio o metales nobles de la familia del platino.	Los materiales pueden ser obtenidos a partir de commodities como carbón o nafta.	Reacciones de equilibrio de acuerdo a la temperatura del reactor. Alta selectividad por los productos intermedios.
Oxidación de butano	Cloruro de rutenio (III), óxido de silicio (II), cloruro de rodio.	Materias primas a partir de la separación del propano y butano del gas natural.	Proceso no es económicamente rentable, debido al alto uso de equipos para la producción y a la necesidad previa de complejidad industrial. Conversión de VAM menor al 40%.
Gas de síntesis	Cloruro de rutenio (III), óxido de silicio (II), cloruro de rodio.	Materias primas a partir del gas natural u otras fuentes de carbón.	Proceso no es económicamente rentable, debido al alto uso de equipos para la producción y a la necesidad previa de complejidad industrial.
Ácido Acético + Etileno + Oxígeno (fase líquida)	Sales de paladio.	Alta conversión de producto.	Problemas operativos en la presión conocidos. Operación en fase líquida en desuso industrial.

Ruta química	Catalizador	Ventajas	Desventajas
Ácido Acético + Etileno + Oxígeno (fase gas)	Sales de paladio con dopamientos.	Alta conversión de producto y selectividad de reacción.	Reacción secundaria (oxidación de etileno a monóxido de carbono).

Fuente: Elaboración propia en base a Narváez (2014)

De lo expuesto anteriormente, empezamos el descarte de rutas químicas obsoletas debido a la antigüedad del proceso. En el caso de la síntesis química del VAM, descartamos la ruta en fase líquida del ácido acético y del acetileno, debido a la antigüedad de la operación (reportada en la literatura como la primera ruta química desarrollada sin uso industrial), toxicidad conocida del mercurio y su baja biodegradabilidad.

En el mismo sentido, descartamos la ruta del anhídrido acético y acetaldehído, debido a la antigüedad del proceso, el cual solo manejó una planta a nivel industrial en México hasta el año 1991 por la empresa Celmex (Bienewald et al., 2019), además del desuso de las materias primas mencionadas por etileno, y el potencial toxicológico de los catalizadores utilizados.

Finalmente, en el ámbito de obsolescencia, se descarta la ruta del ácido acético, etileno y oxígeno en fase líquida, debido a su reemplazo por la fase gaseosa, que representa mayor conversión en el proceso global y las especificaciones de producto requeridas.

El siguiente aspecto de descarte considera eliminar las rutas más complejas en la producción industrial. En este ámbito, se descartan las rutas de petroquímica integradas, tales como la oxidación de butano y el gas de síntesis, debido a que no se cuentan con tales integraciones a nivel local e implicarían mayor dimensionamiento a nivel industrial, haciendo el beneficio económico inicial insostenible para la operación.

De lo anteriormente expuesto, podemos observar que las rutas químicas con mayor relevancia en la actualidad y poca complejidad, serían las del ácido acético y acetileno en fase gaseosa, así como el ácido acético, oxígeno y etileno en fase gaseosa. Teniendo el descarte preliminar, procederemos a realizar el análisis de indicadores de acuerdo a la metodología de Narváez (2014).

5.1.3. Aplicación de los indicadores de sostenibilidad de Narváez

Se procedió a realizar la ponderación de los indicadores de Narváez usando los indicadores de las tablas 6 – 9 previamente descritos. Las condiciones de operación y parámetros para los indicadores fueron descritas en el Anexo 1.

Tabla 11

Aplicación de indicadores de seguridad química

Aspecto	Indicadores	Ácido acético + etileno + oxígeno	Ácido acético + acetileno
Seguridad química	Explosividad	0.12	0.41
	Reactividad	0.21	0.43
	Inflamabilidad	0.45	0.75
Índice seguridad química		0.26	0.53

Fuente: Elaboración propia en base a Narváez (2014)

Tabla 12*Aplicación de indicadores de seguridad de proceso*

Aspecto	Indicadores	Ácido acético + etileno + oxígeno	Ácido acético + acetileno
Seguridad del proceso	Temperatura	0.46	0.53
	Presión	0.24	0.11
	Conversión	0.70	0.20
	Rendimiento	0.10	0.02
	Calor de reacción	0.58	0.20
Índice seguridad proceso		0.42	0.21

Fuente: Elaboración propia en base a Narváez (2014)

Tabla 13*Aplicación de los indicadores ambientales*

Aspecto	Indicadores	Ácido acético + etileno + oxígeno	Ácido acético + acetileno
Ambientales	GWP (potencial de calentamiento global)	0.22	0.26
	PCOP (potencial oxidación fotoquímica)	0.19	0.41
	FBC (factor de bioconcentración)	0.35	0.46
	DP (degradabilidad)	0.18	0.26

Aspecto	Indicadores	Ácido acético + etileno + oxígeno	Ácido acético + acetileno
	AATP (L/mg) (toxicidad acuática aguda)	0.73	0.59
	CATP (L/mg) (toxicidad acuática crónica)	0.77	0.73
Índice ambiental		0.41	0.45

Fuente: Elaboración propia en base a Narváez (2014)

Tabla 14

Aplicación de los índices de salud ocupacional

Aspecto	Indicadores	Ácido acético + etileno + oxígeno	Ácido acético + acetileno
Salud ocupacional	HTPI (kg/mg) (potencial de dosis letal)	0.84	0.74
	HTPE (m3/kg) (potencial de dosis en limite umbral)	0.73	0.51
	Toxicidad	0.36	0.59
Índice salud ocupacional		0.64	0.61

Fuente: Elaboración propia en base a Narváez (2014)

Tabla 15*Resumen de indicadores de Narváez*

Aspecto	Ácido acético + etileno + oxígeno	Ácido acético + acetileno
Seguridad química	0.26	0.53
Seguridad del proceso	0.42	0.21
Ambientales	0.41	0.45
Salud ocupacional	0.64	0.61
Total de indicadores	1.73	1.80

Fuente: Elaboración propia en base a Narváez (2014)

De la información calculada por medio de los indicadores de Narváez, se observó que la ruta química con menor ponderación total de indicadores, es la ruta adecuada para la síntesis del proceso de acetato monómero de vinilo (VAM), siendo en esta evaluación la ruta química en fase gaseosa de ácido acético, etileno y oxígeno (oxoacetilación).

5.1.4. Preliminares de la simulación en Aspen Hysys v11

Descripción del simulador Aspen Hysys v11

Los parámetros a simular en este diseño conceptual son aquellos referentes a la fase de operación necesarios para la evaluación económica preliminar del proyecto, y la posterior referencia en fases superiores del diseño, de acuerdo con (Pahl et al., 2007) y (Peters et al., 2003). En este sentido, se utiliza el software de simulación de procesos Aspen Hysys versión 11, debido a su amplio uso en el diseño conceptual y optimización

de procesos químicos, el cual utiliza bases de datos reconocidas como NIST y DECHEMA para los datos termodinámicos, así como una variedad de técnicas para la convergencia de soluciones por medio del algoritmo de solución de ecuaciones MESH (materia, energía, entropía y entalpía).

Para proceder adecuadamente con el proceso de simulación, se debe escoger y validar el modelo termodinámico adecuado, así como el modelo de convergencia matemática adecuado para realizar la simulación.

Selección de componentes a utilizar en la simulación

El primer paso es la selección de componentes a simular en este proceso. Debido a que se eligió la ruta química de oxoacetilación, se consideran los siguientes componentes de la tabla 16 a ingresar en la simulación. Se debe tener consideración en escoger el componente adecuado en este paso, debido a que existen mezclas como el caso del aire en los que se tuvo que escoger los componentes por separado, para el adecuado balance químico de reacción y modelo cinético.

Tabla 16

Componentes a simular en Aspen Hysys

Componente	Número CAS
Ácido acético	64-19-7
Etileno	74-85-1
Oxígeno	7782-44-7
Nitrógeno	7727-37-9
Acetato de vinilo monómero	108-05-4
Agua	7732-18-5
CO ₂	124-38-9

Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v11

Selección de modelo termodinámico a utilizar en la simulación

De acuerdo a las condiciones de operación del proceso, descritas por (Dimian et al., 2019), (Chaves et al., 2015), (Bienewald et al., 2019), debemos utilizar un modelo termodinámico que nos permita simular las condiciones en fase gaseosa del proceso.

(Gmehling et al., 2019) propone que el modelo termodinámico mas adecuado para este proceso es el modelo NRTL de la figura (Hayden - O'Connell Equation of State), debido a que se cuentan con sistemas polares y no polares en combinación, de acuerdo con la ruta química seleccionada. Con ello, se podrán calcular las propiedades en fase vapor requeridas.

Figura 8

Modelo termodinámico NRTL en Aspen Hysys

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_{j=1}^n \tau_{ji} x_j G_{ji}}{\sum_{k=1}^n x_k G_{ki}} + \sum_{j=1}^n \frac{x_j G_{ij}}{\sum_{k=1}^n x_k G_{kj}} \left(\tau_{ij} - \frac{\sum_{m=1}^n \tau_{mj} x_m G_{mj}}{\sum_{k=1}^n x_k G_{kj}} \right)$$

$$G_{ij} = \exp(-\tau_{ij} \alpha_{ij})$$

$$\tau_{ij} = \frac{a_{ij} + b_{ij} T}{RT}$$

Fuente: AspenTech (2018)

Nota:

γ_i = Coeficiente de actividad del componente i

x_i = Fracción molar del componente i

T = temperatura (K)

n = Número total de componentes

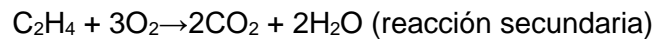
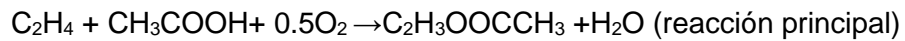
a_{ij} = Parámetro de energía no dependiente de temperatura entre componentes i & j (cal/gmol).

B_{ij} = Parámetro de energía no dependiente de temperatura entre componentes i & j (cal/gmol-K).

α_{ij} = Constante no aleatoria para la interacción binaria NRTL.

Selección del modelo cinético a utilizar en la simulación

Para la cinética a simular, se escoge el entorno Kinetics en Aspen Hysys v11 el cual nos permite analizar la conversión del proceso de manera más eficiente, según (Gmehling et al., 2019) y (Haydary, 2019). Las reacciones a simular son las mostradas a continuación:



El modelo cinético usando ley de potencias en presiones parciales se basa en el trabajo de (Han et al., 2004), descrito posteriormente usando simulación por (Contreras et al., 2008).

$$r_{VAM} = k_1 P_{C_2H_4}^{\alpha_1} P_{O_2}^{\beta_1}$$

$$r_{CO_2} = k_2 P_{C_2H_4}^{\alpha_2} P_{O_2}^{\beta_2}$$

$$k = A \times \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right)$$

Donde $P_{C_2H_4}$ es la presión parcial del etileno, P_{O_2} es la presión parcial del oxígeno y k es la constante cinética de reacción, la cual se encuentra dada por la ecuación de Arrhenius, ya que la velocidad de reacción depende de la temperatura de operación. Los valores del factor preexponencial, serán de acuerdo a la temperatura de reacción del proceso (Contreras et al., 2008). Los parámetros de la cinética de la reacción se tabulan en la tabla 17, y fueron ingresados de la manera descrita en el anexo 2.

Tabla 17

Parámetros cinéticos de las reacciones para el acetato monómero de vinilo (VAM)

Reacción	Potencias cinéticas		Constantes cinéticas		
	C ₂ H ₄	O ₂	E	A ₁	A ₂
	(KJ/Kmol)				
Principal	0.35	0.21	15000	2.65x10 ⁻⁴	7.95x10 ⁻⁵
Secundaria	-0.31	0.82	21000	7.50x10 ⁻⁴	2.25x10 ⁻⁴

Fuente: Han et al. (2004)

Nota: Para la ecuación $r = kP_{C_2H_4}^\alpha P_{O_2}^\beta$

α : Valor de potencia cinética del etileno.

β : Valor de potencia cinética del oxígeno.

E: Energía de activación, energía mínima necesaria para iniciar la reacción.

A: Factor de preexponencialidad, constante que involucra factores como las colisiones y orientación de las moléculas a reaccionar, dependientes del rango de temperatura a trabajar en la reacción.

5.1.5. Metodología de Douglas para la simulación del proceso de acetato monómero de vinilo usando diseño conceptual

(Douglas, 1985) definió el modelo heurístico propuesto para el desarrollo de un diseño de casos base con evaluación económica preliminar y alternativas de diseño en 5 niveles heurísticos. En este sentido, la heurística permite proveer definiciones de diseño conceptual para los equipos a utilizar en un proceso.

Usualmente, algunos autores como (Márquez, 2003) definen los niveles de diseño basado en decisiones según lo plantea Douglas (1985, pág. 2).

Nivel 1: Proceso por lotes o continuo

Márquez sugiere dos criterios para decidir cuál es la mejor opción a decidir:

- Si el proceso es continuo, la producción deberá ser mayor a 5000 TM/año.
- Si el proceso es batch, la producción deberá ser menor a 5000 TM/año.

Adicionalmente, se debe revisar la estacionalidad del proceso (factor de mercado) para no generar inventarios extras que produzcan baja rotación del producto terminado, así como evaluar los periodos de vida cortos de productos.

Considerando que el VAM es un producto intermedio para la producción de otros bienes en el mercado y además es considerado un producto commodity, la mejor estrategia para asegurar buenos márgenes de operación es por medio de un proceso continuo.

Se muestra en la siguiente tabla los mercados de importación desde donde se realizaron compras de VAM hacia el Perú. De acuerdo con (Trade Map, 2020), existen cerca de 300 compañías locales que exportan productos desde mercados como Estados Unidos, China o Taipei.

Tabla 18

Valor de transacciones en dólares americanos de acetato monómero de vinilo al Perú

Exportadores a Perú	2015	2016	2017	2018	2019
USA	9278	8389	8093	12428	8148
China	191	692	750	61	24
Taipei	34	40	731	380	0
Paises Bajos	0	37	0	0	0
Total Mundo	9503	9158	9574	12870	8172

Fuente: ITC Trade (2020)

Nivel 2: Estructuras de entradas y salidas

Douglas (1985) y Márquez (2003) sugieren hacer las siguientes preguntas como estrategia.

¿Debemos purificar las corrientes de materia prima antes de procesar y/o procesar las impurezas en la alimentación?

- **Ácido acético:** El ácido acético a nivel industrial se recibe a una pureza mayor a 99% p/p, según (Le Berre et al., 2011), la impureza hace referencia a 0,15% en peso de agua, la cual no se retira en la etapa inicial debido a que luego se produce, tanto en la reacción primaria como secundaria.
- **Oxígeno:** A efectos de la simulación, la corriente de aire ingresante al proceso se considera como 21% de oxígeno y el restante como 79% de nitrógeno. Sin embargo, la separación del aire podría considerarse como una etapa previa al diseño.
- **Etileno:** El etileno se recibirá directamente de la refinería, con una pureza de 99,92%, se registran impurezas de metano y etano que representan 800 ppm. Al encontrarse estas en cantidades despreciables no se considera necesaria la purificación y tampoco fueron consideradas estas cantidades de impureza en la simulación. Industrialmente se considera que el metano y el etano se oxiden a dióxido de carbono.
- Ninguna de las corrientes de entrada posee impurezas considerables para el catalizador.

¿Cuántas corrientes de productos habrá en el proceso?

- Se estimó 1 corriente de productos en el proceso, perteneciente al caso del VAM.

¿Se necesitan corrientes de reciclo y de purga en el proceso, y cuáles son los costos asociados con estas corrientes?

- Fue necesario un reciclo, debido a la baja conversión del etileno en el reactor en un paso, al igual que con el ácido acético sin reaccionar. Usando una corriente de purga, podemos eliminar las impurezas de la materia prima en el proceso (agua generada, CO₂). Los costos asociados implicarían mayor dimensionamiento y tiempo de operación en los equipos a diseñarse.

¿Deberían los subproductos ser recuperados o reciclados hasta la desaparición?

- Siendo los subproductos CO₂ y H₂O, no es necesario recuperar los productos de alguna de las etapas previas de diseño.

¿Cuáles son los costos asociados con la pérdida de selectividad para reacciones complejas?

- La reacción seleccionada presenta dos reacciones totales, de carácter no irreversible, adicionalmente no existe pérdida de selectividad asociada en reacciones complejas (como en el caso de polimerizaciones o reacciones biológicas), por lo que no aplica al caso en estudio.

Al finalizar este nivel, se planteó el balance de materia global del proceso, para calcular el potencial económico preliminar. Se presentan en la tabla 19, las variables del proceso global.

Tabla 19

Variables de entrada y salida para el proceso global

Variable	Tipo	Definición
F _{O₂}	Flujo	Flujo de entrada de oxígeno
F _E	Flujo	Flujo de entrada de etileno
F _{AA}	Flujo	Flujo de entrada de ácido acético

Variable	Tipo	Definición
F_{VAM}	Flujo	Flujo de acetato monómero de vinilo (VAM)
F_P	Flujo	Flujo de purga total
F_{H_2O}	Flujo	Flujo de salida del agua del proceso
y_E	Composición	Fracción de etileno al ingreso del proceso
y_A	Composición	Fracción de ácido acético al ingreso.
y_{PE}	Composición	Fracción de etileno en la purga.
y_{PCO_2}	Composición	Fracción de CO_2 en la purga.
X	Conversión	Conversión del oxígeno. $X = \frac{\text{mol de } O_2 \text{ convertido}}{\text{mol de } O_2 \text{ alimentado}}$
S	Selectividad	Selectividad del VAM respecto al oxígeno convertido. $S = \frac{\text{mol de VAM a la salida}}{\text{mol de } O_2 \text{ convertido}}$

Fuente: Elaboración propia en base a Douglas (1985)

A partir de definir las variables de proceso global, se realizó el balance de materia respectivo por cada componente del proceso. En este procedimiento de balance, no se consideran compuestos inertes, debido a que, en estado estacionario, no existe acumulación y la entrada es igual a la salida de éstos.

Tabla 20*Balance de materia global por componente*

Componente	Balance de materia global
Ácido acético	$F_{AA} \times y_A - F_{O_2} \times X \times S = 0$
Oxígeno	$F_{O_2} - F_P \times y_{PCO_2} - F_{O_2} \times X = 0$
Etileno	$F_E \times y_E - F_P \times y_{PE} - F_{O_2} \times X \times S - F_{O_2} \times X \times (1 - \frac{S}{2}) \times (\frac{1}{3}) = 0$
Acetato monómero de vinilo (VAM)	$F_{VAM} - F_{O_2} \times X \times S = 0$
Dióxido de carbono	$F_P \times y_{PCO_2} - F_{O_2} \times X \times (1 - \frac{S}{2}) \times (\frac{2}{3}) = 0$
Agua	$F_{AA} \times y_{H_2O} - F_{H_2O} + F_{O_2} \times X \times (1 - \frac{S}{2}) \times (\frac{2}{3}) = 0$

Fuente: Elaboración propia en base a Douglas (1985)

El potencial económico (PE) o valor neto de corrientes, de acuerdo con (Douglas, 1985) está dado por:

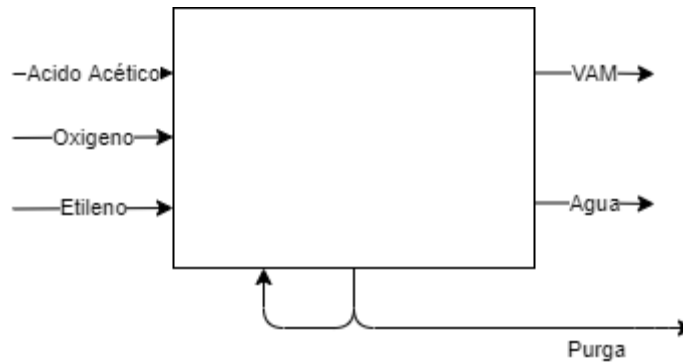
$$PE = \text{Valor producto} + \text{Valor Subproductos} - \text{Costos Materias Primas}$$

$$PE = F_{VAM} \times C_{VAM} - F_{AA} \times C_{AA} - F_E \times C_E - F_{O_2} \times C_{O_2}$$

Donde C_i: Precios de materias primas.

Figura 9

Balance global de componentes



Nivel 3: Estructura de reactores y reciclo

En este nivel, Douglas (1985) y Márquez (2003) sugieren hacer las siguientes preguntas como estrategia.

¿Cuántos sistemas de reactores se requieren?

- Debido a la conversión media de la reacción para este proceso, se considera un solo reactor. Adicionalmente, no se requieren múltiples catalizadores o sistemas de reactores debido a que no se trabajan a distintas temperaturas o presiones.

¿Existen sistemas de separación entre reactores?

- No, puesto que se considera más de un reactor. Después de la salida al reactor, se propuso un sistema de separación con reciclo y purga. De acuerdo con las reglas heurísticas en esta etapa, no es conveniente separar dos componentes y a continuación, volverlas a mezclar en la entrada al reactor.

¿Cuántos flujos de reciclos se requieren?

- De acuerdo a la heurística, se consideraron dos reciclos. Uno en fase gaseosa para el etileno y otro en fase líquida para el ácido acético, de modo que se pueda

reaccionar todo en el reactor propuesto. Con ello, también se hace mención que se requerirá de un compresor para la corriente en fase gas y una bomba en fase líquida.

¿Deseamos un exceso de un reactivo a la entrada del reactor?

- Se propuso utilizar un exceso de ácido acético, para desplazar la distribución de productos a lo largo del proceso. Se debe tener cuidado con añadir el ácido acético en exceso, puesto que cantidades de reactante pueden favorecer la selectividad a costa de aumentar los costos en las etapas de separación del producto deseado – siendo el caso de estudio – el acetato monómero de vinilo.

¿Se requiere un compresor de gas?

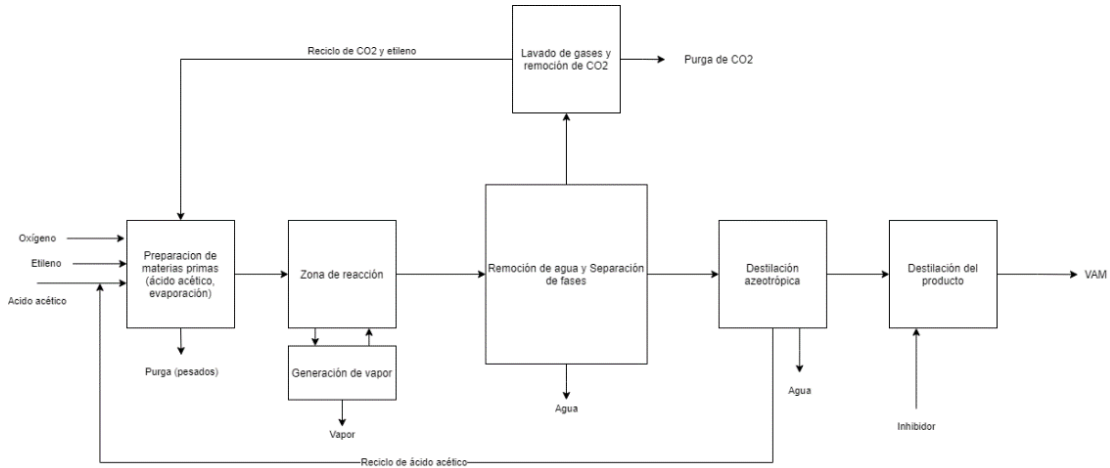
- Sí, como se mencionó antes, es necesario un compresor para impulsar el reciclo de etileno en el proceso.

¿Debe operarse el reactor adiabáticamente, con calentamiento directo o enfriamiento, o se requiere un diluyente o portador de calor?

- El balance energético nos indica que la reacción no debe operarse en modo adiabático. Tampoco se requiere algún diluyente o portador de calor.

Figura 10

Estructura general de reciclaje y reactores



Nivel 4: Estructura general del sistema de separación

En este nivel, Douglas (1985, 1988), Márquez (2003) y Upadhye et al. (2011), proponen tres categorías de separación de acuerdo a las fases de materia en las que se desarrolla el proceso a conceptualizar.

Debido a que el objetivo en esta etapa es separar el producto deseado, que es el acetato monómero de vinilo (VAM) de componentes sin reaccionar como el ácido acético, etileno, u otros subproductos como el CO₂ o el agua, se debe procurar usar etapas y parámetros de diseño que nos permitan la separación por medio de puntos de ebullición, lavado de gases o inhibición.

Nivel 4.1: Sistema de recuperación de vapores

¿Se necesita un sistema de recuperación de fase vapor? ¿Cuál es la localización propuesta de este sistema de fase vapor? (purga, reciclaje o separación flash)

- Se requiere una separación flash de la fase vapor y líquida a la salida del reactor, debido a que se contempló usar una temperatura menor para condensar parte del producto y lograr mejor recuperación del producto deseado. Para una separación adecuada del producto y recirculación de material no reaccionado, se añadió una corriente de ácido acético (corriente *makeup*) a fin de conseguir mejor recuperación del VAM.
- La fase gaseosa fue llevada a un absorbedor de gases (*scrubber*). Debido a que la fase vapor de estas corrientes contiene etileno sin reaccionar, fue conveniente unir corrientes en fase vapor y retornarlas al proceso por medio de un reciclo.
- Para lograr separar el ácido acético, el agua y el VAM, se requiere que el producto ingrese sin remanentes de fases vapor al destilador. Por lo que se sugirió un desgasificador adicional, a fin de hacer recircular las corrientes ricas en etileno de nuevo hacia el reactor.
- Se considera que una parte de las corrientes de reciclo, debe ser considerada como una purga del proceso, a fin de no saturar el ingreso al reactor con CO₂ proveniente de la fase vapor.

¿Cuál es el sistema de recuperación de fase vapor? (condensación, destilación criogénica, absorción, adsorción, membranas, sistema con destilación reactiva).

Se contemplaron los siguientes equipos para separación en fase vapor:

- Separador flash (a la salida del producto condensado).
- Absorbedor de gases (*scrubber*).
- Separador flash (degasificador previo a la destilación).

Nivel 4.2: Sistema de recuperación de líquidos

¿Cuáles son los métodos para remover los productos ligeros y cuál es su destino final?

- Una vez removida la fase vapor, se procede a remover por destilación el sistema ternario del ácido acético, agua y acetato monómero de vinilo (VAM). Debido a los puntos de ebullición conocidos, se obtuvo que los productos de fondo estarán compuestos por el ácido acético no reaccionado.
- En el tope del destilador, se consideraron dos corrientes a condensación total, separando así el agua del tope con las fases orgánicas, el cual contiene principalmente VAM. Para poder cumplir con las especificaciones del producto ((ASTM, 2013), fue necesaria una destilación adicional para lograr retirar la mayor cantidad de impurezas, como el etileno o el ácido acético aun remanentes.

¿Qué separación se puede alcanzar con una extracción líquido-líquido?

- Se usó glicerol debido a la diferencia de solubilidades, durante el proceso de destilación. Esto con el fin de poder arrastrar en fase líquida compuestos remanentes como el agua o el ácido acético.

¿Qué clase de separación se puede lograr por destilación, como se manejan los azeótropos en la corriente de recicló?

- Destilación azeotrópica.
- Destilación con inhibidor.

¿Cuál es la secuencia de las columnas en la destilación?

Se procura separar mediante destilación tanto el ácido acético como el agua remanente. La corriente de fondos del primer destilador, es un producto rico en ácido acético, por lo que pudo ser recirculado hacia dos etapas, antes del ingreso al reactor y antes del ingreso al absorbedor (*scrubber*).

Si la destilación es impráctica, ¿Qué otros métodos deberíamos usar para la separación?

(Seader et al., 2016) define cinco tipos de técnicas de separación, con la finalidad de mejorar la transferencia de masa de ciertos componentes respecto de otros.

- Por creación de fases, usando ESA (agente separador de energía) como el calor (añadido o recibido) o la despresurización de un proceso.
- Por adición de fases, usando MSA (agente separador de masa) como un solvente o líquido absorbente.
- Por separación de barreras, usando membranas semipermeables.
- Por agentes de separación sólidos (reacción, películas adsorbentes, cromatografía).
- Por separación de gradiente, como campos eléctricos o magnéticos, gravedad, electroforesis.

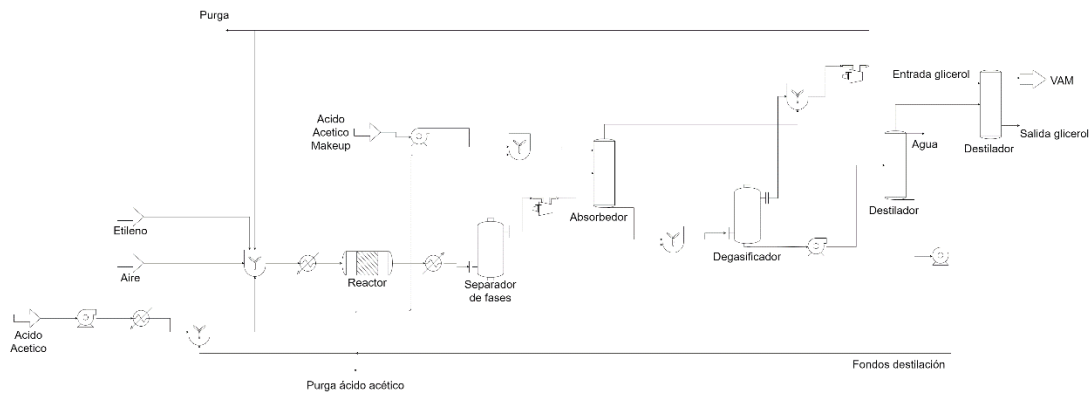
Durante la simulación de este proceso usando esta metodología conceptual, se usarán las primeras dos técnicas debido a la aplicación en el simulador Aspen Hysys v11, sin desmerecimiento de las tres técnicas restantes.

Nivel 4.3: Sistema de recuperación de sólidos

Debido a que el sistema opera únicamente en dos fases, no tiene relevancia para esta conceptualización realizar las preguntas del nivel correspondiente.

Figura 11

Estructura general del sistema de separación



Nivel 5: Estructura general del sistema de generación de calor e intercambiadores de calor

En este nivel, Douglas (1985, 1988), Márquez (2003) y Upadhye et al. (2011), proponen seleccionar las fuentes de generación de calor a utilizar y los requerimientos de intercambiadores. Debido a que la metodología se basa en condiciones de optimización de corrientes, no se abordan los referentes en detalle.

Para la generación de calor, todos los equipos usaran suministros potenciados por electricidad. No se consideran recuperaciones de corrientes de vapor en el proceso o un análisis *pinch* en detalle.

Teniendo en cuenta la metodología heurística desarrollada, se llevó al simulador los procedimientos de selección de equipos e interacción entre equipos, así como datos utilizados a la evaluación en el anexo 2, 3 y 4. Para la convergencia del simulador en las corrientes de reciclo es necesario el uso de la herramienta *Recycle*, la cual utiliza el

método de Wegstein debido a que no ofrece restricciones en el número de variables o ecuaciones a resolver en la simulación modular (AspenTech, 2014).

Los balances de masa y composiciones de todo el proceso fueron detallados en los anexos 6 y 7. Para la inicialización de datos, se propuso los valores propuestos en la literatura por (Chaves et al., 2015; Varbanov et al., 2020).

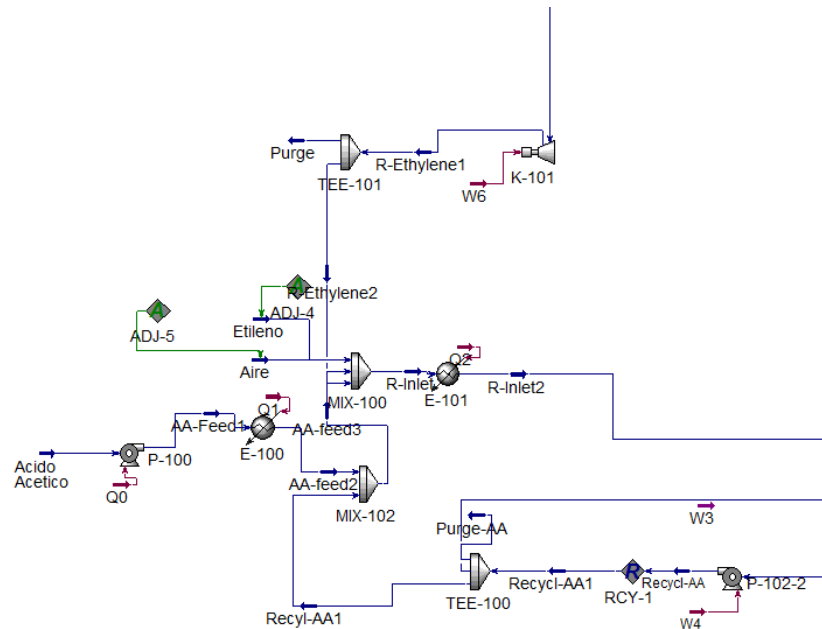
5.1.6. Evaluación de los equipos a simular en el proceso en la zona de alimentación

En esta primera zona se hacen ingresar las materias primas al proceso, etileno en fase gas, ácido acético en fase líquida, y el aire en fase gas obtenido de los alrededores del proceso, con el fin de alcanzar las condiciones requeridas de operación. Se observa que antes del ingreso al reactor se consideran dos corrientes de ingreso adicionales, pertenecientes a las corrientes de reciclaje del etileno y del ácido acético, respectivamente.

En este proceso, se han considerado que tanto el aire y el etileno ya ingresan a condiciones previas de presión y temperatura especificados al vendedor de las materias primas, por lo que no se contemplaron equipos adicionales de compresión o de calentamiento.

Figura 12

Zona de alimentación en el proceso



Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys

Tabla 21

Equipos de la zona de alimentación del proceso

Identificación preliminar	Descripción
P-100	Bomba de alimentación del ácido acético.
E-100	Calentador del ácido acético.
E-101	Calentador de mezcla a reaccionar.

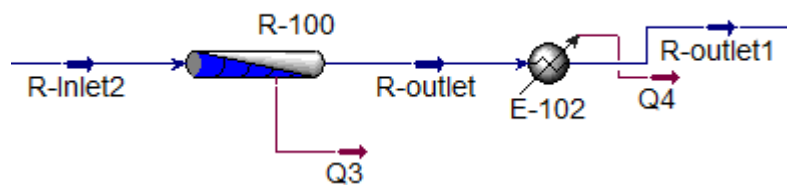
El análisis de los grados de libertad para cada equipo se explica en el anexo 5.

5.1.7. Evaluación de los equipos a simular en el proceso en la zona de reacción

Una vez realizado el acondicionamiento de las materias primas y de las corrientes de reciclo, se proceden a ingresar al reactor de lecho fijo a las condiciones de presión y temperatura ofrecidas por la literatura.

Figura 13

Zona de reacción del proceso



Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys

Tabla 22

Equipos de la zona de reacción del proceso

Identificación preliminar	Descripción
R-100	Reactor del proceso.
E-102	Condensador de mezcla de salida.

El análisis de los grados de libertad para cada equipo se explica en el anexo 5.

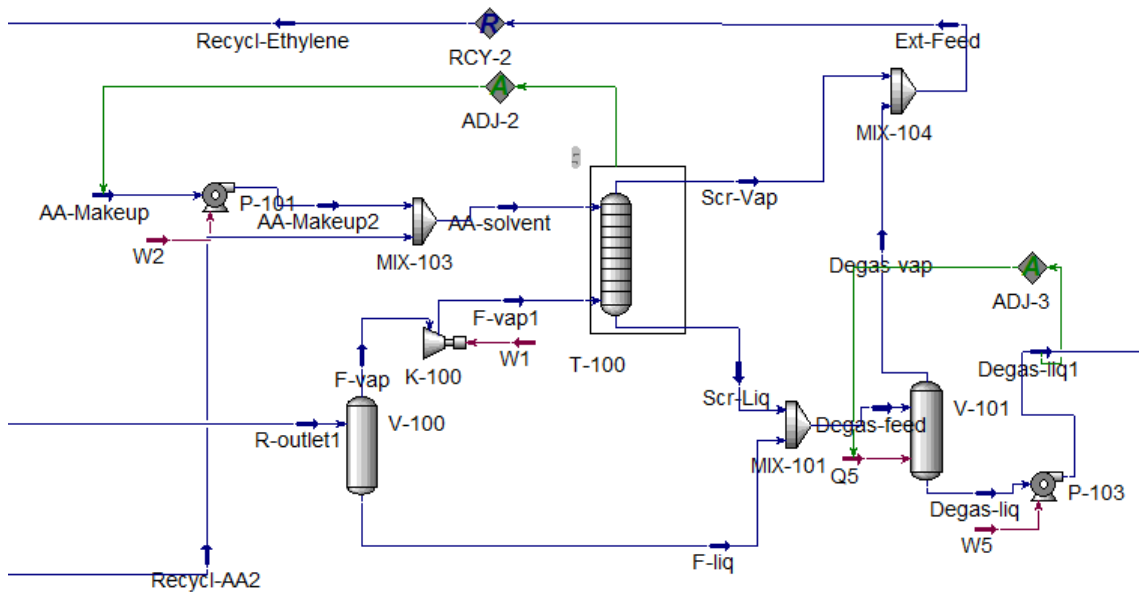
5.1.8. Evaluación de los equipos a simular en el proceso en la zona de separación de fases

El producto obtenido a la salida del reactor, aun no ofrece las especificaciones de producto requeridos en lo relativo a la pureza mínima, además de contener reactivos como el ácido acético y etileno sin haber reaccionado. A ello, también se suma la

cantidad de CO₂ generada por la reacción secundaria. En esta etapa se consideró una corriente adicional de ácido acético para favorecer la separación de las fases en el absorbedor.

Figura 14

Zona de separación de fases del proceso



Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys

Tabla 23

Equipos de la zona de separación de fases del proceso

Identificación preliminar	Descripción
V-100	Separador flash.
T-100	Absorbedor (<i>scrubber</i>)
K-100	Compresor de la fase gas alimentando al absorbedor.

Identificación preliminar	Descripción
P-101	Bomba de alimentación del ácido acético como <i>makeup</i>
V-101	Degasificador (separador flash)
P-103	Bomba de alimentación de fase líquida al destilador.

El análisis de los grados de libertad para cada equipo se explica en el anexo 5. Es importante resaltar que, a partir de esta etapa, se usó la herramienta de convergencia de corrientes Recycle para la corriente gaseosa rica en etileno y CO₂, con el fin de que el producto pueda ser separado en dos corrientes, una corriente de vuelta al reactor y otra corriente de purga de CO₂, a fin de no saturar el reactor con componentes no deseados.

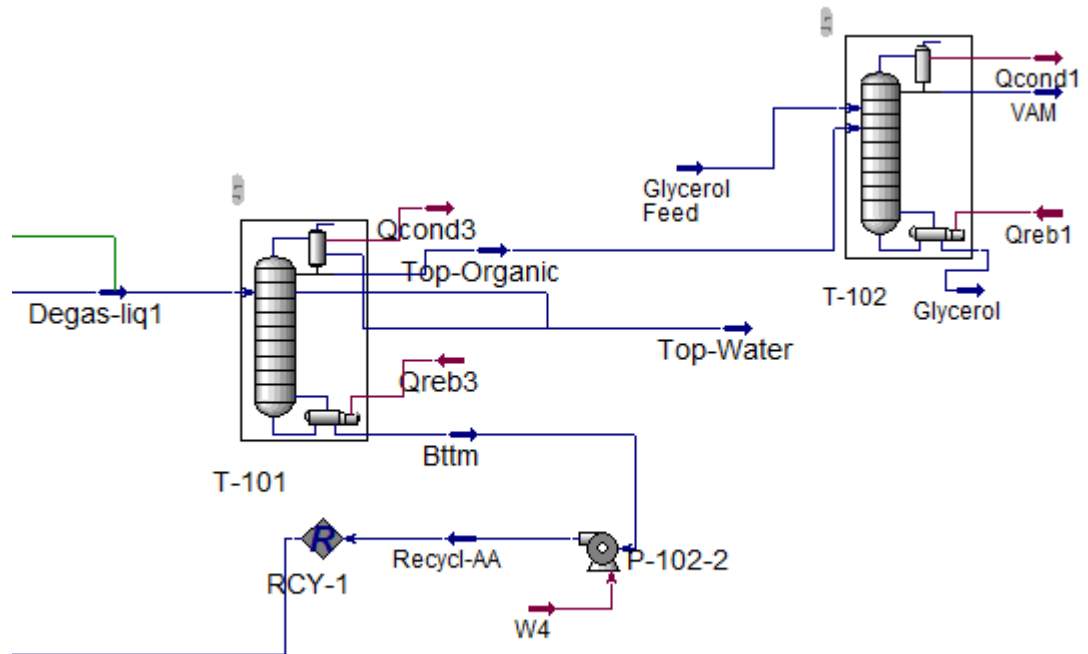
5.1.9. Evaluación de los equipos a simular en el proceso en la zona de destilación

Habiendo separado la mayor parte de la corriente gaseosa, líquida en etileno y CO₂, se requirió separar la mezcla ternaria formada principalmente por el ácido acético – VAM – agua. Este procedimiento se logró por medio de la destilación en fase líquida. Se destiló a condensación total, separando el agua del VAM y los fondos estuvieron constituidos por el ácido acético, el cual fue recirculado al reactor y una parte fue purgada para no saturar el reactor con reactivo en exceso.

Para obtener el VAM con una pureza mayor al 99.9% según especificación del producto, se requirió de una corriente inhibidora de glicerol que pudiera eliminar trazas de otros componentes remanentes como ácido acético, agua o etileno.

Figura 15

Zona de destilación del proceso



Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys

Tabla 24

Equipos de la zona de destilación del proceso

Identificación preliminar	Descripción
T-101	Destilador de la mezcla ternaria
T-102	Destilador para purificación del VAM
P-102	Bomba de retorno de ácido acético al reactor y al absorbedor.

Se comparan las especificaciones del producto obtenido respecto a la normativa ASTM D2190 – 07(2013). Los contaminantes como el acetaldehído o el ácido acético (expresado como acidez) se encuentran por debajo de los máximos permitidos, considerando que la selección de la ruta química influye en la nula producción de acetaldehído.

Tabla 25

Comparación de requisitos vs producto simulado en Aspen Hysys

Especificaciones ASTM	Rangos	Producto obtenido
D2190		por simulación
Rango de destilación (°C)	71.8 – 73.0	71.98
Contenido de agua	Max. 0.05%	0.00%
Contenido de acetaldehído	Max. 0.02%	0.00%
Acidez (expresada como contenido de ácido acético)	Max. 0.005%	0.00%
Contenido de inhibidor	Valor determinado entre el fabricante y el comprador	0.01%
Gravedad específica aparente	0.9335 – 0.9345	No disponible
Color	Max. 5	No disponible

5.1.10. Evaluación económica del proceso de acetato monómero de vinilo obtenido

Se procedió a realizar la simulación del proceso en Aspen Hysys v11, considerando los procedimientos desarrollados desde los preliminares de selección en el simulador hasta la metodología para la selección de equipos.

Costos de manufactura obtenidos

Se llevaron a cabo una vez realizada la simulación descrita en el software Aspen Hysys v11, por medio de la herramienta "Economics", al finalizar la integración y convergencia de los reciclos obtenidos por el programa. Con ello el análisis del proceso para la obtención del acetato monómero de vinilo quedó sujeto a la adición de los precios de las materias primas (ácido acético, etileno, glicerol) y los productos (VAM). En la tabla se presentan los costos. No se consideró al aire como costo de materia prima debido a que no se considera la separación previa del proceso.

Tabla 26

Costos de materias primas y productos en el proceso

Componente	Precio (US\$/TM)
Ácido acético	950
Etileno	650
Glicerol	8
Acetato monómero de vinilo (VAM)	1700

Fuentes: BASF, Statista, ITC Trade (2020)

Los costos asociados al catalizador, descritos por BASF (2020), se estimaron en US\$ 170,000.00. Estos fueron ingresados en el flujo de caja correspondiente en el año cero, durante un periodo de 4 años de vida útil, recomendados por (Navarro & Hernández, 2019).

Los costos de servicio en el proceso también fueron considerados a partir de literatura. No se consideraron los precios sugeridos del software, debido a la antigüedad de los precios, reportados al 2018.

Tabla 27

Costo de servicios en el proceso

Servicios	Costo (US\$/h)
Agua de enfriamiento	232.3
Electricidad	119.3
Vapor	1184.8
Refrigerante	28.1

Fuentes: Navarro y Hernández (2019), Air Products (2020)

Los costos obtenidos de mano de operación, instalación se obtuvieron a partir de la información suministrada en la base de datos del software.

Tabla 28

Costos obtenidos para el proceso

Resumen de costos	Monto
Costo de capital (US\$)	8,626,300.00
Costos operativos (US\$/Año)	51,350,500.00
Costos de materia prima (US\$/año)	40,831,800.00
Costo de ventas (US\$/año)	75,586,600.00
Costos de <i>utilities</i> (US\$)	4,811,470.00
Costo de equipos (US\$)	1,531,300.00
Costo de instalación (US\$)	3,576,400.00

Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys

Tabla 29*Costo de equipos en el proceso*

Identificación preliminar	Costo del equipo (US\$)	Costo de instalación (US\$)
P-100	4,900.00	30,600.00
E-100	10,700.00	78,500.00
E-101	13,900.00	93,600.00
R-100	40,900.00	153,800.00
E-102	11,300.00	72,900.00
V-100	19,000.00	106,500.00
T-100	96,000.00	281,800.00
K-100	699,800.00	860,400.00
P-101	5,900.00	37,000.00
V-101	20,600.00	121,600.00
T-101	261,900.00	557,800.00
T-102	72,500.00	229,400.00
P-102	5,000.00	37,100.00

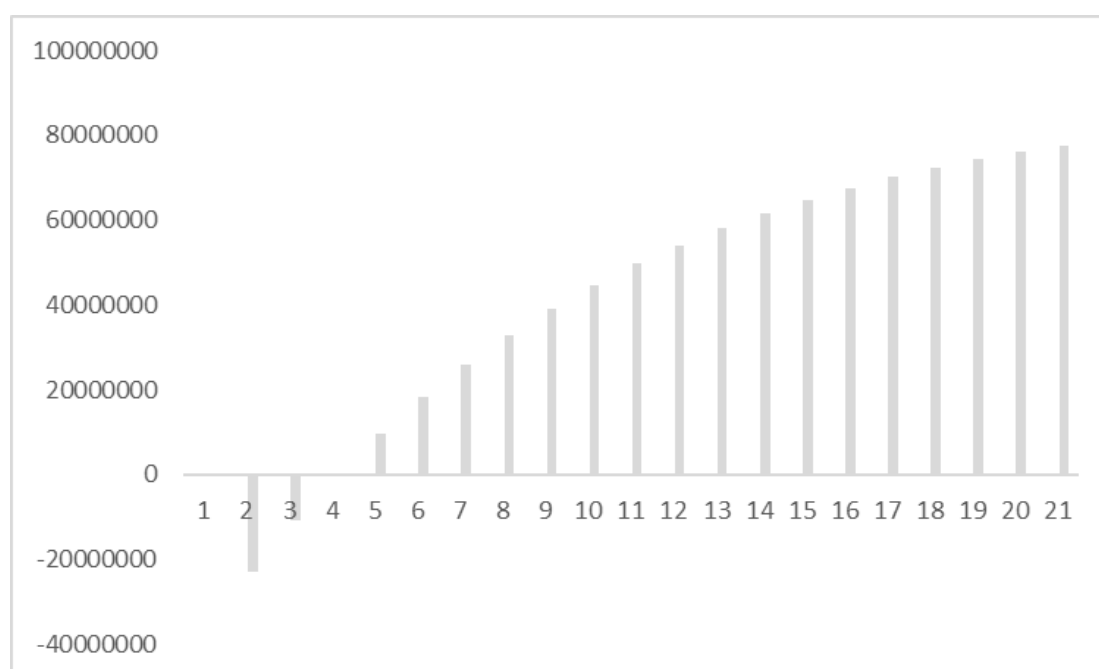
Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys

Para evaluar la rentabilidad del diseño conceptual con los costos propuestos por el simulador, se realiza un flujo de caja correspondiente con el objetivo de determinar tres parámetros econométricos de interés, el valor actual neto (VAN), la tasa de retorno (TIR) y el *payout* del proyecto.

Se consideraron como tasa interna de oportunidad 12%, de acuerdo con (Turton et al., 2018), así como una tasa de inflación de 5% constante. El periodo de evaluación para este proceso fue de 5 años.

Figura 16

Flujo de caja del proceso



Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys

Tabla 30

Resultados econométricos del proceso

Variable econométrica	Valor
VAN (US\$)	2,560,000.00
TIR	20.24%
Payout (años)	4.69

Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys

Con los resultados de la tabla 30, podemos evidenciar que las variables econométricas proyectadas, resultan en rentabilidad positiva del proyecto convirtiéndolo en una alternativa para posteriores fases en un proyecto de ingeniería.

5.2. Resultados inferenciales

No se presentan resultados inferenciales, debido a la naturaleza del problema de investigación.

5.3. Otro tipo de resultados estadísticos, de acuerdo a la naturaleza del problema y la hipótesis.

No se presentan resultados estadísticos, debido a la naturaleza del problema de investigación.

VI.DISCUSIÓN DE RESULTADOS

6.1. Contratación y demostración de la hipótesis con los resultados

6.1.1. Contratación de la hipótesis general

“El diseño conceptual para la síntesis del acetato monómero de vinilo (VAM), se obtiene por medio de la metodología de Douglas y el modelamiento con Aspen Hysys 11”.

La hipótesis general se demuestra a partir de las tres hipótesis específicas, desarrolladas en esta investigación.

6.1.2. Contratación de las hipótesis específicas

“La metodología propuesta permite seleccionar la mejor ruta química para la síntesis de acetato monómero de vinilo (VAM)”.

La tabla 15 indica los resultados de la comparación de rutas químicas tentativas para la selección de la mejor ruta química. En esta evaluación, se determinó que la mejor ruta es la reacción del ácido acético, etileno y oxígeno, debido a que los indicadores promedio determinados por la metodología de Narváez, arrojaron valores menores en comparación con la reacción del ácido acético y el acetileno.

“El comportamiento a nivel estacionario es concordante de acuerdo a los parámetros obtenidos de flujo, presión, temperatura y composición por medio del modelamiento en Aspen Hysys 11”.

Se logra validar esta hipótesis por comparación de los datos establecidos para la simulación a partir de la metodología de Douglas para el diseño conceptual por medio del análisis multinivel establecido en los resultados para cada equipo.

“Es factible obtener rentabilidad económica positiva del modelamiento obtenido por diseño conceptual en Aspen Hysys 11”.

Se logra validar la hipótesis al obtenerse una rentabilidad económica positiva de acuerdo al flujo de caja mostrado en la figura 16 y la tabla 30, a partir del modelamiento obtenido.

6.2. Contrastación de los resultados con otros estudios similares

6.2.1. Selección de la ruta química

A diferencia de publicaciones realizadas en los últimos años, se incorporó la metodología de Narváez para la selección de la ruta química más adecuada que contemple indicadores de seguridad, ambientales y salud ocupacional.

En el trabajo de (Navarro & Hernández, 2019), se discute una metodología ponderativa en escala cuantitativa asignada por los autores, analizando el caso adicional del ácido acético en fase líquida, a diferencia de esta investigación. Se arrojaron resultados similares, a pesar de no considerar en este caso la fase líquida, debido a que fue descartada en la fase preliminar.

Tabla 31

Evaluación multicriterio para la selección de ruta química

Criterio	Ruta acetileno + ácido acético	Ruta ácido acético + etileno + oxígeno (fase líquida)	Ruta ácido acético + etileno + oxígeno (fase gas)
Nivel toxicológico	20	15	20
Seguridad de procesos	9	15	20
Economía	9	11	10

Criterio	Ruta acetileno + ácido acético	Ruta ácido acético + etileno + oxígeno (fase liquida)	Ruta ácido acético + etileno + oxígeno (fase gas)
Pureza requerida	12	13	15
Conversión con base en ácido acético	8	5	10
Total criterios	58	59	75

Fuente: (Navarro & Hernández, 2019)

No se encontraron publicaciones similares haciendo énfasis en la selección de indicadores de sostenibilidad con la metodología de Narváez, por lo que esta investigación propone una nueva alternativa para el análisis para selección de rutas químicas sostenibles en el tiempo.

6.2.2. Metodología de Douglas para la simulación del proceso de acetato monómero de vinilo usando diseño conceptual

Se propuso un diseño conceptual para la síntesis de acetato monómero de vinilo, usando la metodología de Douglas en niveles, sin ingresar a las propuestas de optimización en niveles posteriores.

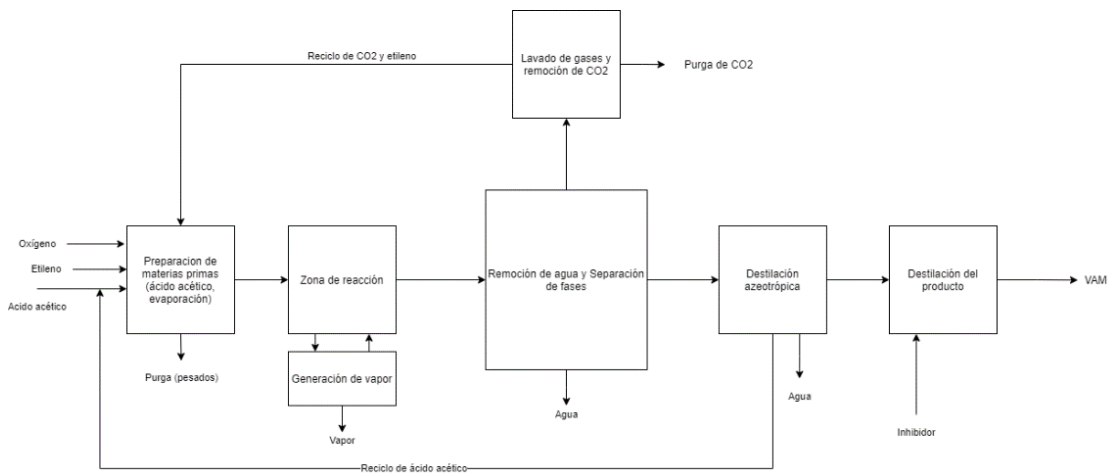
Se respondieron a las interrogantes heurísticas planteadas por Upadyhe (2011) y Douglas (1985), los cuales realizan algunas preguntas metodológicas para el diseño conceptual.

A partir de la información suministrada, se proponen 4 etapas de operación en el proceso: Preparación de materias primas, zona de reacción, separación de fases y

destilación del producto. El modelo presenta concordancia en lo descrito por (Chaves et al., 2015; Contreras et al., 2008; Varbanov et al., 2020).

Figura 17

Propuesta de oxoacetilación usando metodología de Douglas



De acuerdo con (Bienewald et al., 2019), el acetato monómero de vinilo es uno de los ésteres más importantes para producir polímeros a gran escala. El modelo obtenido usando las herramientas de simulación en Aspen Hysys y la metodología heurística de Douglas, nos permite un acercamiento más real al proceso real, tal como lo define la bibliografía descrita.

Descripción de la zona de alimentación simulada:

(Dimian et al., 2019) sugieren que la zona de alimentación debe manejarse a una presión entre 8 – 10 atm, debido a que estos niveles de presión, de acuerdo a la cinética, favorecen la productividad de las reacciones de oxoacetilación, pero también disminuye la selectividad de esta reacción.

Se considera solo el acondicionamiento del ácido acético en fase líquida, por medio de una bomba y posterior calentamiento antes de ingresar al reactor. Adicionalmente, el

ácido acético es el compuesto que presenta el mayor punto de ebullición en el proceso. Para el caso del aire, este ya se considera como una corriente ya comprimida, al igual que el etileno necesario para el proceso, por lo que las presiones pueden ser coordinadas con el encargado del suministro o vendedor en la operación de la planta.

Las condiciones de operación para los equipos se detallan en la siguiente tabla

Tabla 32

Parámetros de equipos en la zona de alimentación

Identificación preliminar	Parámetros de diseño	Cantidad
P-100	NPSHa (m)	9.546
	Eficiencia de la bomba	0.75
	Trabajo neto (KW)	0.50
E-100	Carga térmica (KJ/h)	1.14e+6
E-101	Carga térmica (KJ/h)	2.77e+6

Se observa que el requerimiento para calentar el líquido está condicionado por el ácido acético principalmente. Dado que se usaron corrientes de reciclo para el diseño del proceso, la carga térmica para el calentador E-101, fue menor debido a que las corrientes de reciclo venían desde los procesos de separación posteriores a temperaturas por encima de 200°C, disminuyendo la carga térmica necesaria.

Descripción de la zona de reacción simulada:

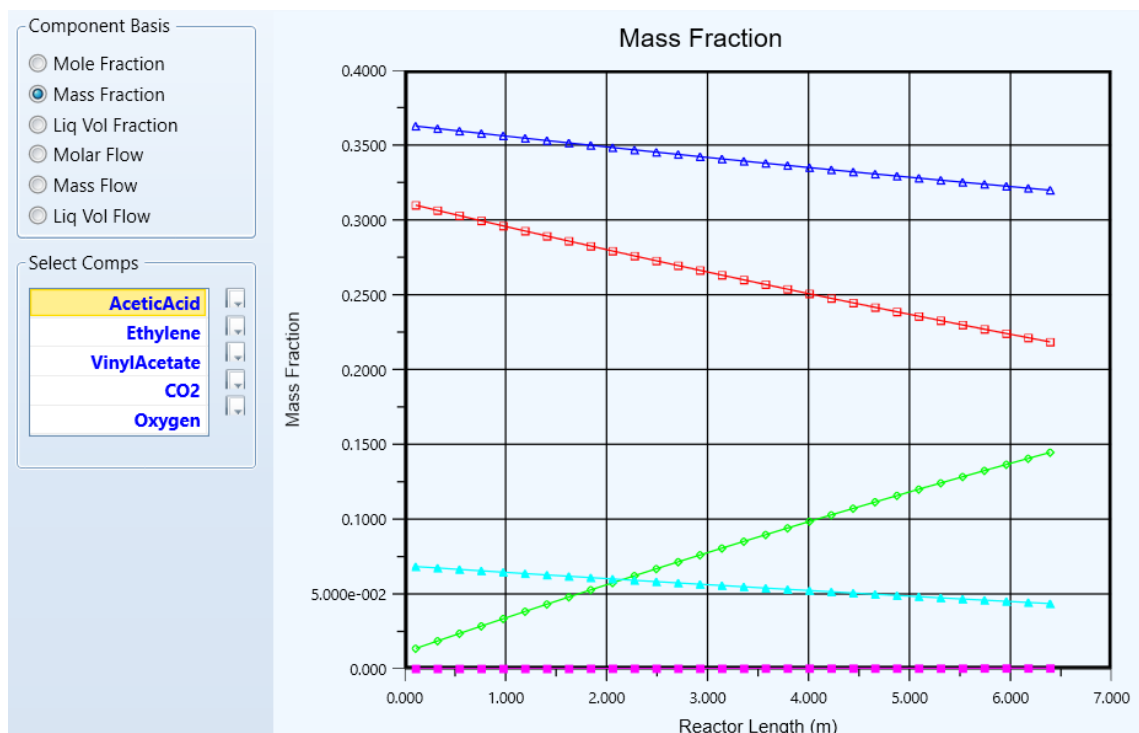
Las condiciones de operación de ingreso al reactor, sugeridas por Contreras et al. (2008) son para reacciones en fase gaseosa de acuerdo a la naturaleza del catalizador a usar, por lo que es imperativo que la mezcla a reaccionar no presente algún componente

líquido. En la simulación se obtuvo una mezcla con una fracción de vapor de 0.9059 y 108.9°C previo al ingreso al reactor, por lo que fue necesario un calentamiento previo.

De acuerdo a lo descrito en la literatura por Navarro & Hernández (2019), Contreras et al. (2008), la temperatura del reactor debe mantenerse por debajo de 200°C, para prevenir el daño no reversible de las zonas activas del catalizador. Se optó por una temperatura de 190°C para obtener una selectividad de la reacción de oxoacetilación por sobre la reacción secundaria, además de usar los valores recomendados por (Han et al., 2004) debido a que los valores cinéticos están en función de la temperatura.

Figura 18

Perfiles de composición másica a lo largo del reactor



Nota 1: Ácido acético: Color rojo.

Nota 2: Etileno: Color azul.

Nota 3: Oxígeno: Color celeste

Nota 4: VAM: Color verde

Nota 5: CO₂: Color morado

La cinética muestra que el catalizador de Pd-Au presento una buena selectividad de reacción principal de oxoacetilación. En este caso, no se necesitaría un proceso adicional para la separación del CO₂.

Debido a que la mezcla reaccionante ingreso al proceso a 190^aC, se evitó el ingreso de líquido al reactor, favoreciendo la preservación de los catalizadores.

Tabla 33

Composición molar a la salida del reactor del proceso

Componente	Fracción molar
Ácido acético	0.1279
CO ₂	0.0003
Etileno	0.4010
Glicerol	0.
H ₂ O	0.0584
Nitrógeno	0.3052
Oxigeno	0.0479
VAM	0.0591

Tabla 34

Parámetros de equipos en la zona de reacción

Identificación preliminar	Parámetros de diseño	Cantidad
R-100	Número de tubos	500
	Espesor de la pared (m)	5e-3
	Altura de los tubos (m)	6.5
	Diámetro de los tubos (m)	3.7e-2
	Fracción de vacío (m)	0.4
	Caída de presión (bar)	1.613
E-102	Carga térmica (KJ/h)	4.828e+6

A la salida del reactor, se requiere iniciar con la separación de fases para poder separar tanto el ácido acético como el etileno no reaccionado. Para ello, disminuirémos la temperatura de la mezcla de salida hasta 70°C, formando dos fases líquida y vapor.

Descripción de la zona de separación de fases simulada:

Debido a que el producto aun no cumple las especificaciones de producto requerido, es necesario separar todos aquellos componentes no deseados del acetato monómero de vinilo (VAM). El interés de esta separación se enfocó en la fase líquida, debido a que el producto se presenta a temperaturas menores a 80°C.

Tabla 35

Parámetros de equipos en la zona de separación de fases

Identificación preliminar	Parámetros de diseño	Cantidad
V-100	Volumen de líquido (m ³)	1.051

Identificación preliminar	Parámetros de diseño	Cantidad
	Diámetro (m)	0.91
	Altura (m)	3.2
	Volumen total (m ³)	2.102
T-100	Tipo	Contacto discontinuo
	Número de etapas	20
	Espaciamiento entre platos (m)	0.6096
	Diámetro (m)	0.87
	Altura (m)	12.19
K-100	Temperatura isentrópica a la salida(°C)	94.35
	Eficiencia	0.75
	Trabajo neto requerido (kW)	94.93
P-101	NPSHa (m)	0.1089
	Eficiencia de la bomba	0.75
	Trabajo neto (KW)	3.05
V-101	Volumen de líquido (m ³)	0.96
	Diámetro (m)	0.762
	Altura (m)	4.191
P-103	NPSHa (m)	0.1821
	Eficiencia de la bomba	0.75
	Trabajo neto (KW)	1.043

Descripción de la zona de destilación simulada:

La última etapa de destilación envió a fondos el ácido acético no reaccionantes, así como separa el agua en una destilación azeotrópica. Se añade un inhibidor al proceso para cumplir con las especificaciones del producto.

Identificación preliminar	Parámetros de diseño	Cantidad
T-101	Número de etapas	20
	Espaciamiento entre platos (m)	0.6096
	Diámetro (m)	2.119
	Altura (m)	18.29
	Carga térmica del reboiler (kJ/h)	3.036e+7
	Carga térmica del condensador (kJ/h)	3.017e+7
T-102	Número de etapas	20
	Espaciamiento entre platos (m)	0.6096
	Diámetro (m)	0.3609
	Altura (m)	12.19
	Carga térmica del reboiler (kJ/h)	1.190e+6
	Carga térmica del condensador (kJ/h)	9.834e+5
P-102	NPSHa (m)	0.1408

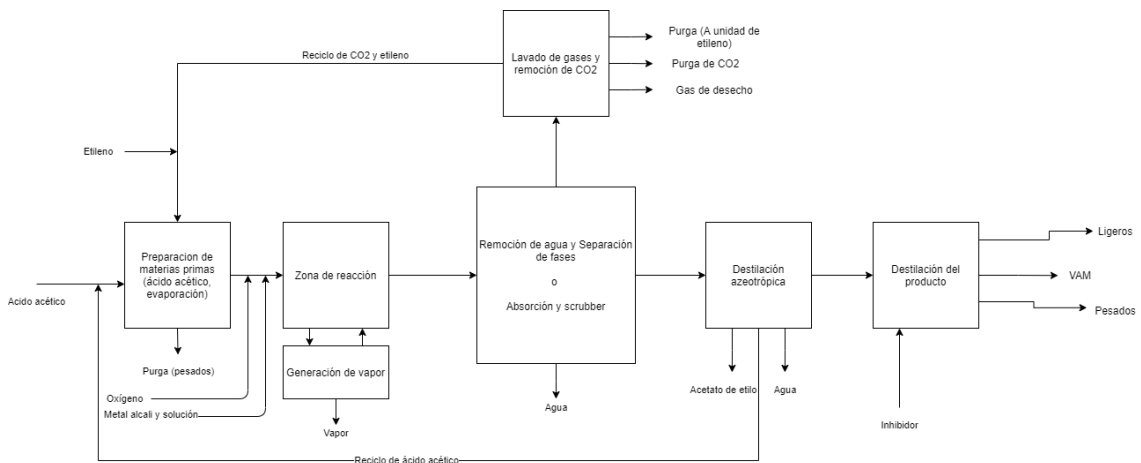
Identificación preliminar	Parámetros de diseño	Cantidad
	Eficiencia de la bomba	0.75
	Trabajo neto (KW)	0.414

Tanto la simulación como lo descrito por Bienewald et al. (pag. 5, 2019), describen un proceso definido en 4 etapas principales: Preparación de las materias primas, zona de reacción, separación de fases y destilación/purificación del VAM.

Bienewald describe que la operación en fase gaseosa presenta problemas de operación a lo largo del reactor, debido a la formación de zonas calientes e inactivación del catalizador, también citado por (Mazanec et al., 2011). La sugerencia del autor es manejar corrientes por debajo de 190°C para prevenir las zonas calientes en el reactor.

Figura 19

Proceso de oxoacetilación del ácido acético

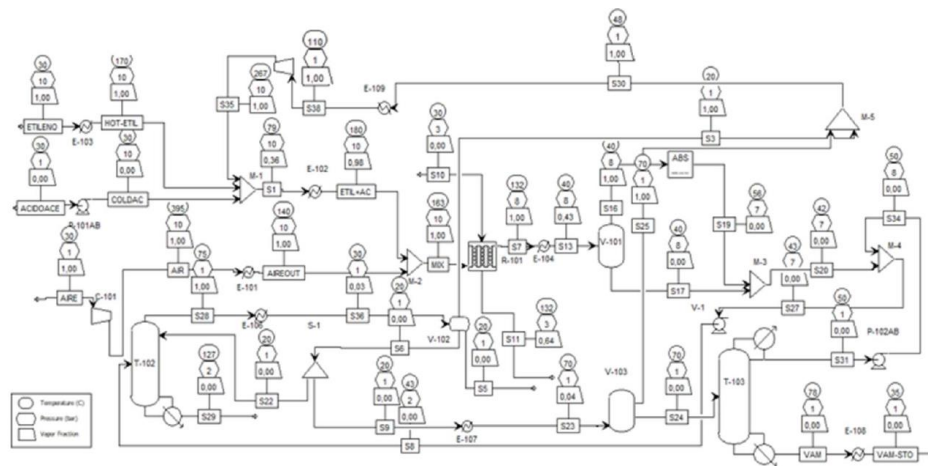


Fuente: Bienewald et al. (2019)

(Navarro & Hernández, 2019) propone un diseño conceptual similar al obtenido por nuestra investigación por medio del software Aspen Plus en tres etapas (alimentación, reacción y purificación). No contempla la adición de un inhibidor en la destilación final.

Figura 20

Proceso propuesto de oxoacetilación por otros autores

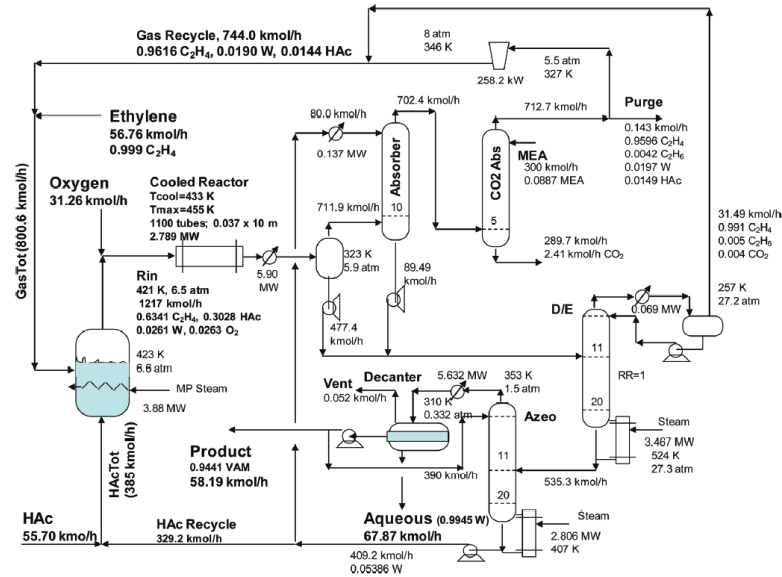


Fuente: Navarro y Hernández (2019)

(Luyben, 2011) realizo una modificación usando simulación en modo dinámico para la obtención de acetato monómero de vinilo (VAM),

Figura 21

Proceso de oxoacetilación en modo dinámico



. Fuente: Luyben (2011)

6.2.3. Evaluación económica del proceso

Se obtiene una rentabilidad económica positiva, de 2,560,000.00 para el VAN y un TIR de 20.24%. La planta simulada por esta metodología cumple con la evaluación económica preliminar para proseguir en futuras etapas de ingeniería (ingeniería de detalle, puesta en marcha, operación del proceso).

Trabajos similares como el de Navarro y Hernández (2019) definieron resultados similares para una planta localizada en Colombia. En el caso de ellos, el VAN obtenido fue \$17.023.283,93 USD con una TIR de 17.03%, por lo que el caso latinoamericano estaría con la suficiente capacidad de desarrollar proyectos como la producción de VAM.

En el trabajo de Boxaider et al. (2011) se obtiene una rentabilidad positiva, sin embargo, el valor del TIR resulta poco atractivo (5%) para proseguir con las etapas

posteriores. Se observó que los resultados propuestos por el autor llevan a conversiones bajas de producto (menores al 25%).

Caballero y Takuda (1993) también definen rentabilidad positiva para un proceso desarrollado a nivel nacional. No obstante, el proceso fue desarrollado en función de una industria petroquímica alterna que no presentó demanda local.

6.3. Responsabilidad ética de acuerdo a los reglamentos vigentes

El autor de la investigación se responsabiliza por la información emitida en el presente trabajo de tesis, de acuerdo al Reglamento del Código de Ética de la investigación de la Universidad Nacional del Callao, según Resolución de Consejo Universitario N°260 – 2019 – CU.

VII. CONCLUSIONES

1. Se propuso una metodología para el diseño conceptual del proceso industrial para la obtención del acetato monómero de vinilo (VAM), por medio de modelamiento mediante el software Aspen Hysys 11, por medio de la evaluación de la mejor ruta química, el comportamiento del proceso en estado estacionario y la estimación de la rentabilidad económica preliminar.
2. La metodología propuesta para la selección de la ruta química usando los indicadores de sostenibilidad de Narváez, determino que la mejor ruta química para la obtención del acetato monómero de vinilo es por medio de la reacción entre el ácido acético, etileno y oxígeno (oxoacetilación) por medio de un catalizador de Pd, con dopaje de Au, para los parámetros evaluados de seguridad química, seguridad de proceso, ambientales y de salud ocupacional.
3. El comportamiento a nivel estacionario fue concordante en las variables de flujo con un valor de 1232 Kg/h, presión de 2 bar y temperatura de 87.26°C a partir del modelamiento y simulación en Aspen Hysys realizados. Basados en la metodología de Douglas, se determinaron cuatro zonas de procesos: zona de alimentación, zona de reacción, zona de separación de fases y purificación. Con las condiciones de proceso y diseño determinadas por el simulador, se consiguió acetato monómero de vinilo al 99.92% de pureza que cumple las especificaciones de producto.
4. Se consiguió una rentabilidad económica del proceso positiva de acuerdo con la simulación realizada, al obtener un VAN de US\$ 2,560,000.00 y una TIR de 20.24%.

VIII. RECOMENDACIONES

1. La selección de la ruta química más óptima en un proceso debe ser evaluada dentro del periodo de vida útil de la planta, puesto que a lo largo del tiempo surgen nuevas potenciales reacciones que pueden favorecer a algunos de los indicadores, así como evaluar sinergias entre procesos que puedan ofrecer materias primas como subproductos, reduciendo significativamente los costos.
2. La metodología heurística permite la selección de una ruta alternativa basada en reglas de diseño usadas en la industria. No obstante, no es el único camino para la obtención de un proceso químico. El éxito de la heurística radica en el conocimiento del proceso en detalle.
3. Se puede mejorar la rentabilidad del proceso, por medio de reducir los costos usando el nivel 5 de la metodología de Douglas, relacionado a la integración de intercambiadores de calor y fuentes energéticas. Una recomendación es realizar la optimización de los equipos usando casos de estudio en la simulación, descritos en este proceso a fin de mejorar los rendimientos del proceso.
4. Las corrientes de purga para el proceso simulado pueden ser reaprovechadas, debido a que se pueden reaprovechar algunos reactantes, ya sea para otros procesos que requieran estas materias primas, disminuyendo los costos de operación y generando sinergia con otros procesos industriales.

IX. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AspenTech. (2014). *EHY202 Aspen Hysys: Advanced Process Modeling Topics*. AspenTech.

ASTM. (2013). Standard Specification for Vinyl Acetate. *Practice, 93*(Reapproved 2013), 2–2. <https://doi.org/10.1520/D2190-07R13.2>

Bienewald, F., Leibold, E., Tužina, P., & Roscher, G. (2019). Vinyl Esters. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, 1–16. https://doi.org/10.1002/14356007.a27_419.pub2

Carrasco, N. (2019). *Introducción a la Simulación de Procesos Químicos* (p. 43). Universidad Nacional de Ingeniería. <https://es.scribd.com/document/248536733/Clases-de-Conocimiento>

Chaves, I. D. G., López, J. R. G., Zapata, J. L. G., Robayo, A. L., & Niño, G. R. (2015). Process analysis and simulation in chemical engineering. In *Process Analysis and Simulation in Chemical Engineering*. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-14812-0>

Collantes Diaz, I. R., Leyva Sánchez, M. P., Mejía Salvatierra, J. P., & Ruíz Muro, D. R. (2017). Planeamiento Estratégico de la Industria Peruana del Plástico. *Pontificia Universidad Católica Del Perú*, 190.

Contreras, J. P., Naranjo, J. C., Ramírez, S., & Martínez, D. M. (2008). Vinyl Acetate from ethylene, acetic acid and oxygen Industrial Plant Simulation. *AIChE Journal*, 1–11. <https://folk.ntnu.no/skoge/prost/proceedings/aiche-2008/data/papers/P134650.pdf>

Dimian, A. C., Bildea, C. S., & Kiss, A. A. (2019). Applications in design and simulation of sustainable chemical processes. In *Applications in Design and Simulation of Sustainable Chemical Processes*. <https://doi.org/10.1016/C2015-0-06856-3>

- Douglas, J. M. (1985). A hierarchical decision procedure for process synthesis. *AIChE Journal*, 31(3), 353–362. <https://doi.org/10.1002/aic.690310302>
- Gmehling, J., Kleiber, M., Kolbe, B., & Rarey, J. (2019). *Chemical Thermodynamics for Process Simulation* (Wiley (ed.); 2nd ed.).
- Han, Y. F., Kumar, D., Sivadinarayana, C., & Goodman, D. W. (2004). Kinetics of ethylene combustion in the synthesis of vinyl acetate over a Pd/SiO₂ catalyst. *Journal of Catalysis*, 224(1), 60–68. <https://doi.org/10.1016/j.jcat.2004.02.028>
- Haydary, J. (2019). *Chemical Process Design and Aspen Plus and Aspen HYSYS Applications* (1st ed.).
- Le Berre, C., Serp, P., Kalck, P., & Torrence, G. P. (2011). Acetic acid in Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry. *Wiley, Weinheim. Doi*, 10(1002), 14356007. https://doi.org/10.1002/14356007.a01_045.pub3
- Luyben, W. L. (2011). Design and control of a modified vinyl acetate monomer process. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 50(17), 10136–10147. <https://doi.org/10.1021/ie201131m>
- Márquez, F. (2003). *Síntesis de procesos químicos*. Universidad de Concepción.
- Mazanec, T., Johnston, V. J., Foster, J. A., City, L., Lindley, D., Tonkovich, A. L., Daly, F. P., Wade, L., Hammock, T., Yuschak, T., Yang, B., City, P., Corporation, C. I., & Data, R. U. S. A. (2011). *US 8029748 B2 - Process and apparatus for improved methods for making vinyl acetate monomer (VAM)*.
- Moncada, L. (2011). Modelamiento y Simulación de Procesos. *Universidad Nacional de Trujillo*, 1, 1–278. <https://www.coursehero.com/u/file/24072881/332569-PROCESOS-QUIMICOS-MODULO-2011pdf/?justUnlocked=1#question>
- Narváez, P. C. (2014). *Diseño Conceptual de Procesos Químicos* (Primera ed). Editorial

Universidad Nacional de Colombia.

Navarro, M., & Hernández, J. P. (2019). *DISEÑO CONCEPTUAL DE UN PROCESO INDUSTRIAL PARA OBTENCIÓN DE MONÓMERO ACETATO DE VINILO EN COLOMBIA*. Universidad de San Buenaventura.

Pahl, G., Beitz, W., Feldhusen, J., & Grote, K. H. (2007). *Engineering Design - A systematic approach* (3rd ed.).

Peters, M., Timmerhaus, K., & West, R. (2003). *Plant Design and Economics for Chemical Engineers* (5th ed.).

Reyna, A. (2017). MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN DEL PROCESO DE ELABORACIÓN DE CONSERVA DE FRUTAS USANDO EL LENGUAJE SIMIO. In *Universidad Nacional del Callao*.

Rudd, D., & Watson, C. (1968). *Estrategia en Ingeniería de Procesos*.

Scenna, N., Aguirre, P., Benz, S., Espinosa, H. J., Ferrero, M., Montagna, J., Mussati, M., Perez, G., Rodriguez, J., Salomone, H., Santa Cruz, A., Tarifa, E., & Vega, J. (1999). *Autor-Editor: Dr. Nicolás José SCENNA*. 840.

Seader, J. D., Henley, E., & Keith Roper, D. (2016). *Separation Process Principles - With Application Using Process Simulators* (4th ed.).

Trade Map. (2020). *Trade Map ITC - List of Peruvian Companies for Vinyl Acetate*.
<https://www.trademap.org/Index.aspx>

Turton, R., Shaeiwitz, J., & Bhattacharyya, D. (2018). *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes* (5th ed.). Prentice Hall.

Upadhye, A. A., Qi, W., & Huber, G. W. (2011). Conceptual process design: A systematic method to evaluate and develop renewable energy technologies. *AIChE Journal*,

57(9), 2292–2301. <https://doi.org/10.1002/aic.12733>

Varbanov, P. S., Chin, H. H., Popescu, A. E. P., & Boldyryev, S. (2020). Thermodynamics-based process sustainability evaluation. *Energies*, 13(9), 1–28. <https://doi.org/10.3390/en13092132>

Vinyl Acetate Council. (2019). *Guía para el manejo seguro del Acetato de Vinilo* (Vol. 1). Vinyl Acetate Council.

Zhang, L., Fung, K. Y., Wibowo, C., & Gani, R. (2018). Advances in chemical product design. *Reviews in Chemical Engineering*, 34(3), 319–340. <https://doi.org/10.1515/revce-2016-0067>

ANEXOS

ANEXO 1: Matriz de consistencia

TITULO: "MODELAMIENTO Y SIMULACIÓN EN ASPEN HYSYS 11 PARA LA OBTENCIÓN DE ACETATO MONÓMERO DE VINILO (VAM) UTILIZANDO DISEÑO CONCEPTUAL DE PROCESOS"

Problema General	Objetivo General	Hipótesis	Variable Dependiente	Dimensiones	Indicadores	Metodología
¿Cómo sería el diseño conceptual de procesos mediante modelamiento y simulación en Aspen Hysys 11 para la obtención de acetato monómero de vinilo?	Obtener acetato monómero de vinilo (VAM) utilizando diseño conceptual de procesos mediante modelamiento y simulación en Aspen Hysys 11.	El diseño conceptual para la síntesis del acetato monómero de vinilo (VAM), se obtiene por medio de la metodología de Douglas y el modelamiento con Aspen Hysys 11.	Y= Diseño conceptual para la síntesis del VAM.	• Parámetros de simulación • Rentabilidad económica	-	<p>Tipo de Investigación: No experimental, alcance descriptivo.</p> <p>Población: Información a partir de la información bibliográfica</p> <p>Muestra: Modelamiento obtenido en Aspen Hysys.</p> <p>Técnicas e Instrumentos: Fuentes primarias y secundarias de recolección de información bibliográfica. Técnicas de simulación de procesos químicos para el cálculo durante el modelamiento en Aspen Hysys 11.</p>
Problemas Específicos	Objetivos Específicos	Hipótesis Específicas	Variables Independientes	Dimensiones	Indicadores	
¿Cuál es la selección de ruta química más adecuada para la obtención de acetato monómero de vinilo (VAM)?	Seleccionar la ruta química más adecuada para la obtención de acetato monómero de vinilo (VAM).	La metodología propuesta permite seleccionar la mejor alternativa para la síntesis de acetato monómero de vinilo (VAM).	X1= Metodología para síntesis de acetato monómero de vinilo (VAM).	Características metodológicas.	Seguridad química. Seguridad del proceso. Ambientales. Salud ocupacional.	
¿Cómo se comportan los parámetros obtenidos en nivel estacionario después del modelamiento en Aspen Hysys 11?	Evaluar el comportamiento a nivel estacionario de los parámetros obtenidos por medio del modelamiento en Aspen Hysys 11.	El comportamiento a nivel estacionario es concordante de acuerdo a los parámetros obtenidos de flujo, presión, temperatura y composición por medio del modelamiento en Aspen Hysys 11.	X2= Comportamiento de parámetros en la simulación.	Parámetros de simulación	Temperatura (T) - °C Presión (P) - KPa, bar Flujo (F) - Kg/h	
¿Cuál sería la rentabilidad económica preliminar al implementar el modelamiento obtenido por diseño conceptual?	Estimar la rentabilidad económica preliminar del modelamiento obtenido por diseño conceptual en Aspen Hysys 11.	Se obtiene rentabilidad económica positiva del modelamiento obtenido por diseño conceptual en Aspen Hysys 11.	X3= Rentabilidad económica del modelamiento obtenido.	Rentabilidad económica.	VAN – Adimensional TIR - Adimensional	

ANEXO 2: Consideraciones en el ingreso de data en Aspen Hysys 11

Figura 22

Ingreso de componentes en Aspen Hysys 11

Component	Type	Group
VinylAcetate	Pure Component	
H2O	Pure Component	
Oxygen	Pure Component	
Glycerol	Pure Component	
Ethylene	Pure Component	
CO2	Pure Component	
AceticAcid	Pure Component	
Nitrogen	Pure Component	

Status: OK

Figura 23

Ingreso de modelo termodinámico en Aspen Hysys 11

Fluid Package: Basis-1

Set Up Binary Coeffs StabTest Phase Order Tabular Notes

Package Type: HYSYS Component List Selection: Component List - 1 [HYSYS Databanks] View

Property Package Selection:

- Braun K10
- BWRS
- Chao Seader
- Chien Null
- Clean Fuels Pkg
- CPA
- Esso Tabular
- Extended NRTL
- GCEOS
- General NRTL
- Glycol Package
- Grayson Streed
- IAPWS-IF97
- Kabadi-Danner
- Lee-Kesler-Plocker
- MBWR
- NBS Steam
- NRTL**
- Pena-Robinson

Activity Model Specifications:

Vapour Model	PR
Density Method	Costald
UNIFAC Estimation Temp	25.0000 C
Use Poynting Correction	<input checked="" type="checkbox"/>

No Parameters required for the selected Property Package.

Figura 24

Selección de parámetros de interacción binaria del modelo termodinámico seleccionado

Activity Model Interaction Parameters

Coeff Matrix To View: Aij Bij Alpha_{ij} / C_{ij}

	VinylAcetate	H2O	Oxygen	Glycerol	Ethylene	CO2	AceticAcid	Nitrogen
VinylAcetate	---	2466.36	-12.163	872.122	17.005	69.676	-146.856	20.032
H2O	445.790	---	183.962	490.664	-215.472	-183.691	-219.724	186.205
Oxygen	1496.73	-8747.550	---	2351.91	0.000	0.000	2054.400	0.000
Glycerol	2282.73	-901.328	-12.163	---	17.005	69.676	473.438	20.032
Ethylene	-1334.13	86.831	0.000	-230.743	---	0.000	-641.357	0.000
CO2	-3910.03	676.278	0.000	-3286.24	0.000	---	-3532.190	0.000
AceticAcid	772.731	842.608	-12.163	-526.669	17.005	69.676	---	20.032
Nitrogen	-100.449	-8623.130	0.000	1185.12	0.000	0.000	732.950	---

Property Pkg: **OK**

Figura 25

Selección de parámetros cinéticos para la reacción primaria del acetato monómero de vinilo (VAM)

Kinetic Reaction: Rxn-1

Stoichiometry and Rate Info

Component	Mole Wt.	Stoich Coeff	Fwd Order	Rev Order
Ethylene	28.054	-1.000	0.35	0.00
AceticAcid	60.052	-1.000	0.00	0.00
VinylAcetate	86.091	1.000	0.00	0.00
H2O	18.015	1.000	0.00	0.00
Oxygen	32.000	-0.500	0.21	0.00
Add Comp				

Balance Error: 0.00000
Reaction Heat (25 C): -1.8e+05 kJ/kgmole

Basis: **Partial Pres**

Base Component: Ethylene
Rxn Phase: Overall
Min. Temperature: -273.1 C
Max Temperature: 3000 C

Basis Units: kPa
Rate Units: kgmole/m3-s

Forward Reaction: A: 1.2120e-002, E: 15000, b: <empty>
Reverse Reaction: A': <empty>, E': <empty>, b': <empty>

Equation Help:
 $r = k * f(\text{Basis}) - k' * f'(\text{Basis})$
 $k = A * \exp \{ -E / RT \} * T ^ b$
 $k' = A' * \exp \{ -E' / RT \} * T ^ b'$
 T in Kelvin

Ready

Figura 26

Selección de parámetros cinéticos para la reacción secundaria del acetato monómero de vinilo (VAM)

Kinetic Reaction: Rxn-2

Stoichiometry and Rate Info

Component	Mole Wt.	Stoich Coeff	Fwd Order	Rev Order
Ethylene	28.054	-1.000	-0.31	0.00
Oxygen	32.000	-3.000	0.82	0.00
CO2	44.010	2.000	0.00	2.00
H2O	18.015	2.000	0.00	2.00
Add Comp				

Balance

Balance Error	0.00000
Reaction Heat (25 C)	-1.3e+06 kJ/kgmole

Basis

Basis	Partial Pres
Base Component	Ethylene
Rxn Phase	Overall
Min. Temperature	-273.1 C
Max Temperature	3000 C

Basis Units: kPa
Rate Units: kgmole/m3-s

Forward Reaction

A	6.4099e-004
E	21000
b	<empty>

Reverse Reaction

A'	<empty>
E'	<empty>
b'	<empty>

Equation Help

$r = k^*f(\text{Basis}) - k'^*f(\text{Basis})$

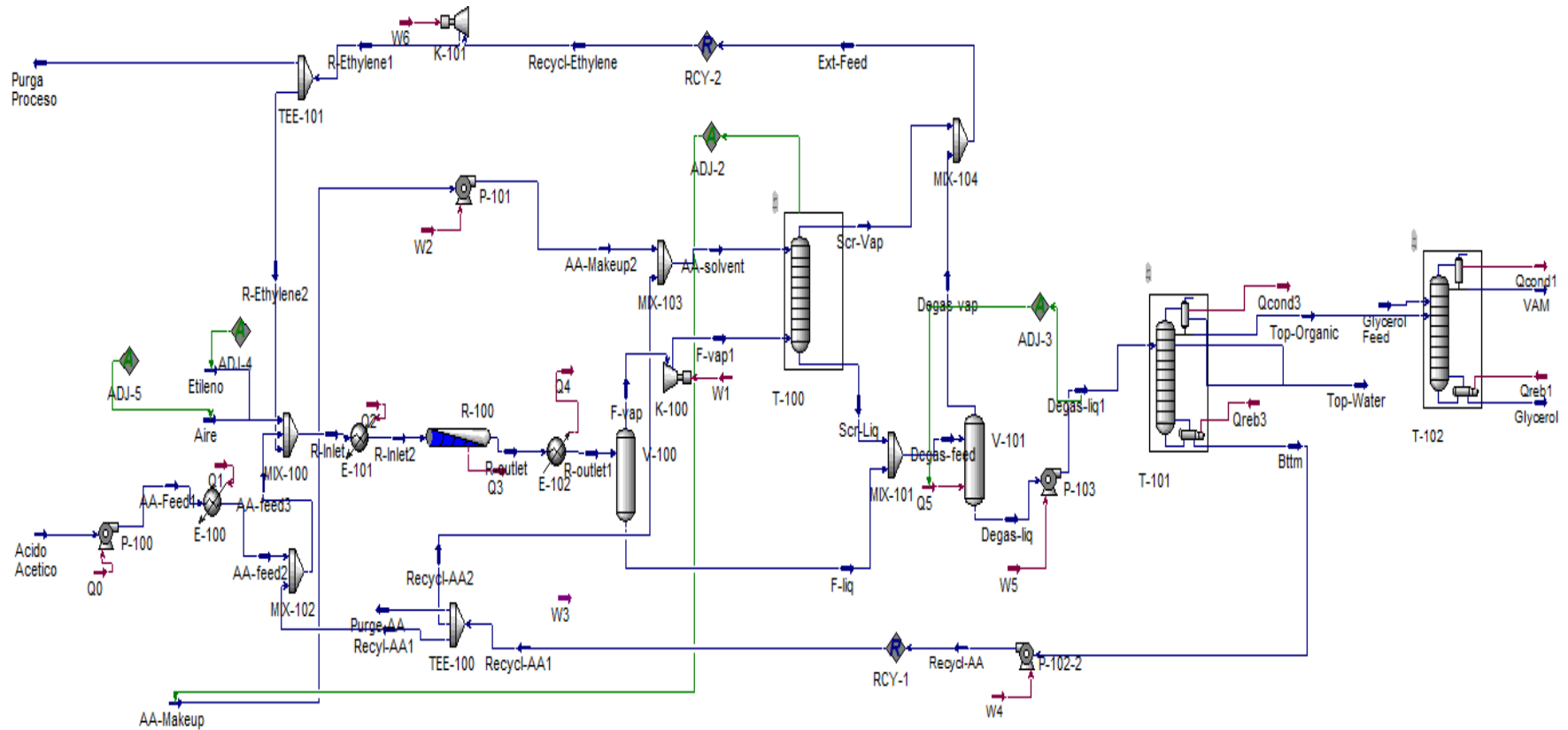
$k = A * \exp \{ -E / RT \} * T ^b$

$k' = A' * \exp \{ -E' / RT \} * T ^b'$

T in Kelvin

Ready

ANEXO 3: Simulación propuesta en Aspen Hysys del acetato monómero de vinilo (VAM)



Fuente: Elaboración propia en base a Varbanov (2020)

ANEXO 4: Datos de inicialización en la simulación

Tabla 36

Inicialización de corrientes y composiciones de ingreso al proceso

	Aire	Etileno	Ácido Acético	Glicerol
Presión (bar)	1.013	1.013	1.013	2
Temperatura (°C)	25	25	25	100
Fracción vapor	1	1	0	0
<i>Composiciones másicas</i>				
Ácido acético	0	0	1	0
CO ₂	0	0	0	0
Etileno	0	1	0	0
Glicerol	0	0	0	1
H ₂ O	0	0	0	0
Nitrógeno	0.7671	0	0	0
Oxígeno	0.2329	0	0	0
VAM	0	0	0	0

Fuente: Varbanov et al. (2020),

Para realizar ajustes en el modelamiento en Aspen Hysys, se hizo uso de dos herramientas de solución modular, la herramienta Recycle, ubicada en los nodos de reciclo para ayudar a una rápida convergencia y la herramienta Adjust, para definir condiciones de operación específicas que debe cumplir el proceso, de acuerdo a la literatura. (Varbanov et al., 2020).

De acuerdo al modelo de planta presentado por (Contreras et al., 2008), se sugieren algunos controles en el proceso para un modelamiento similar a una operación en planta.

Tabla 37*Consideraciones en la herramienta lógica Adjust*

Herramienta	Descripción
Adjust	
ADJ-2	Ajusta el flujo de ácido acético para controlar la recuperación en la corriente líquida a 90%.
ADJ-3	Ajusta la corriente de calor Q5, para controlar la fracción molar de etileno en la corriente líquida del degasificador a 0.001.
ADJ-4	Ajusta el flujo molar de etileno para controlar la relación molar de etileno/ácido acético a 3.
ADJ-5	Ajusta el flujo molar de aire, para controlar la relación molar de O ₂ /ácido acético a 0.5.

ANEXO 5: Análisis de grados de libertad de los equipos del proceso

Se propone la metodología de (Navarro & Hernández, 2019) para el análisis de los grados de libertad.

Tabla 38

Grados de libertad en intercambiadores de calor

Variable	Grado de libertad
Flujo por componente	$3+4N_c$
Temperatura	4
Presión	4
Carga térmica al equipo	N_c
Balance de masa	$2N_c$
Balance de energía	2
Flujo por componente a la entrada	$-2N_c$
Presión de entrada y salida	-4
Temperatura salida	-4
Grados de libertad	0

Nota: N_c =Número de componentes.

Tabla 39

Grados de libertad en equipos de presión (bombas, compresores)

Variable	Grado de libertad
Flujo por componente	$2N_c$
Temperatura	2
Presión	1
Trabajo del equipo	N_c
Balance de masa por componente	2
Balance de energía	1

Variable	Grado de libertad
Flujo total a la entrada	-1
Presión de entrada	-1
Temperatura entrada	-1
Presión de salida	-1
Grados de libertad	0

Tabla 40

Grados de libertad en el reactor

Variable	Grado de libertad
Flujo por componente	2Nc
Tasa de reacción	Nr
Volumen del reactor	1
Calor transferido	1
Entalpías	2Nc
Presión y temperaturas	4
Constantes cinéticas	Nr
Composiciones	Nc
Balance de masa	Nc
Entalpia por componente	2Nc
Constantes cinéticas	2Nr
Concentraciones	Nc
Flujo inicial	-Nc
Presión y temperatura inicial	-2
Parámetro de transferencia de energía	-1
Velocidad de reacción	Nr
Ecuación de diseño del reactor	1
Ecuación de caída de presión de Ergun	1
Grados de libertad	0

Nota: Nr=Número de reactantes.

Tabla 41*Grados de libertad en el condensador*

Variable	Grado de libertad
Flujo por componente	$3+4N_c$
Temperatura	4
Presión	4
Carga térmica al equipo	N_c
Balance de masa	$2N_c$
Balance de energía	2
Flujo por componente a la entrada	$-2N_c$
Presión de entrada y salida	-4
Temperatura salida	-4
Grados de libertad	0

Tabla 42*Grados de libertad en el separador flash y en el degasificador*

Variable	Grado de libertad
Flujo por componente	$3+2N_c$
Balance de masa	N_c
Balance de energía	1
Ecuación de equilibrio	N_c
Sumatoria de composiciones en fase L-V	2
Grados de libertad	0

Tabla 43

Grados de libertad en el absorbedor

Variable	Grado de libertad
Flujo por plato	$3N_p+2N_p*N_c$
Balance de masa en cada etapa	N_p*N_c
Balance de entalpia por etapa	N_p
Ecuación de equilibrio	N_p*N_c
Sumatoria de composiciones en fase L-V	$2N_p$
Grados de libertad	0

Nota: N_p =Número de platos.

Tabla 44

Grados de libertad en la torre de destilación T-101

Variable	Grado de libertad
Flujo por plato	$3N_p+2N_p*N_c$
Balance del reboiler	N_c+4
Carga térmica del reboiler	-1
Balance de masa por etapa	N_p*N_c
Balance de masa en el reboiler	N_c+1
Ecuación de equilibrio	N_p*N_c
Sumatoria de composiciones en fase L-V	$2N_p$
Balance de entalpia por etapa	N_p
Balance de entalpia en el reboiler	1
Grados de libertad	0

Tabla 45*Grados de libertad en la torre de destilación T-102*

Variable	Grado de libertad
Flujo por plato	$3N_p+2N_p*N_c$
Balance del reboiler y condensador	N_c+8
Carga térmica del reboiler	-1
Balance de masa por etapa	N_p*N_c
Balance de masa en el reboiler y condensador	N_c+2
Ecuación de equilibrio	N_p*N_c
Sumatoria de composiciones en fase L-V	$2N_p$
Balance de entalpia por etapa	N_p
Balance de entalpia en el reboiler y condensador	1
Relación de reflujo	1
Grados de libertad	0

ANEXO 6: Resultados de balance de materia del simulador Aspen Hysys

Name	Air	Ethylene	R-Inlet	AA-Feed	R-Inlet2	R-outlet	F-vap	F-liq
Vapour Fraction	1.0000	1.0000	0.9054	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000
Temperature [C]	25.00	25.00	108.9	25.00	195.0	195.0	70.00	70.00
Pressure [bar]	9.000	9.000	9.000	1.013	9.000	7.387	6.887	6.887
Molar Flow [kgmole/h]	133.7	161.6	418.9	30.00	418.9	407.6	333.6	73.96
Mass Flow [kg/h]	3859	4533	1.434e+004	1802	1.434e+004	1.434e+004	1.037e+004	3968
Liquid Volume Flow [m3/h]	4.460	11.83	23.25	1.713	23.25	22.46	18.56	3.902
Heat Flow [kJ/h]	-9563	8.386e+006	-2.294e+007	-1.382e+007	-2.017e+007	-2.416e+007	4.603e+005	-2.945e+007

Name	AA-Feed1	AA-feed2	F-vap1	AA-Makeup	Scr-Vap	Scr-Liq	Degas-feed	Degas-vap
Vapour Fraction	0.0000	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0003	1.0000
Temperature [C]	25.66	205.7	94.35	117.8	99.68	93.95	86.31	175.1
Pressure [bar]	9.000	9.000	9.000	1.013	3.500	8.500	6.887	6.887
Molar Flow [kgmole/h]	30.00	30.00	333.6	162.3	370.1	157.9	231.9	38.69
Mass Flow [kg/h]	1802	1802	1.037e+004	9748	1.252e+004	9517	1.348e+004	2216
Liquid Volume Flow [m3/h]	1.713	1.713	18.56	9.270	20.45	9.212	13.11	2.233
Heat Flow [kJ/h]	-1.381e+007	-1.267e+007	8.021e+005	-7.330e+007	-1.783e+007	-6.883e+007	-9.828e+007	-1.368e+007

Name	Degas-liq	Recycl-AA1	AA-feed3	AA-solvent	R-outlet1	Recyl-AA1	Recycl-AA2	AA-Makeup2
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.4665	0.0000	0.8185	0.0000	0.0000	0.0000
Temperature [C]	175.1	200.2	205.7	132.6	70.00	200.2	200.2	118.4
Pressure [bar]	6.887	9.000	9.000	9.000	6.887	9.000	9.000	9.000
Molar Flow [kgmole/h]	193.2	160.2	62.05	194.4	407.6	32.05	32.05	162.3
Mass Flow [kg/h]	1.127e+004	9620	3726	1.167e+004	1.434e+004	1924	1924	9748
Liquid Volume Flow [m3/h]	10.88	9.149	3.543	11.10	22.46	1.830	1.830	9.270
Heat Flow [kJ/h]	-8.135e+007	-7.089e+007	-2.684e+007	-8.746e+007	-2.899e+007	-1.418e+007	-1.418e+007	-7.329e+007

Name	Ext-Feed	Recycl-Ethylene	R-Ethylene1	Purge	R-Ethylene2	Degas-liq1	Purge-AA	Bttm
Vapour Fraction	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Temperature [C]	110.2	110.2	192.1	192.1	192.1	175.3	200.2	200.1
Pressure [bar]	3.500	3.500	9.000	9.000	9.000	9.000	9.000	8.050
Molar Flow [kgmole/h]	408.8	410.2	410.2	348.7	61.53	193.2	96.14	161.6
Mass Flow [kg/h]	1.474e+004	1.479e+004	1.479e+004	1.257e+004	2218	1.127e+004	5772	9702
Liquid Volume Flow [m3/h]	22.68	22.75	22.75	19.34	3.413	10.88	5.490	9.228
Heat Flow [kJ/h]	-3.151e+007	-3.158e+007	-2.984e+007	-2.536e+007	-4.475e+006	-8.135e+007	-4.253e+007	-7.149e+007

Name	Top-Organic	Top-Water	Recycl-AA	VAM	Glycerol	Glycerol Feed
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Temperature [C]	113.2	113.2	200.2	87.26	191.2	100.0
Pressure [bar]	5.000	5.000	9.000	2.000	4.000	2.000
Molar Flow [kgmole/h]	21.01	10.58	161.6	14.33	16.68	10.00
Mass Flow [kg/h]	1353	214.4	9702	1232	1042	921.0
Liquid Volume Flow [m3/h]	1.436	0.2167	9.228	1.315	0.8514	0.7305
Heat Flow [kJ/h]	-6.699e+006	-2.964e+006	-7.149e+007	-4.911e+006	-8.174e+006	-6.594e+006

ANEXO 7: Resultados de composiciones del simulador Aspen Hysys

Name	Air	Ethylene	R-Inlet	AA-Feed	R-Inlet2	R-outlet	F-vap	F-liq
Comp Mole Frac (VinylAcetate)	0.0000	0.0000	0.0034	0.0000	0.0034	0.0591	0.0411	0.1402
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0025	0.0000	0.0025	0.0584	0.0189	0.2369
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.2100	0.0000	0.0741	0.0000	0.0741	0.0479	0.0586	0.0000
Comp Mole Frac (Glycerol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Ethylene)	0.0000	1.0000	0.4444	0.0000	0.4444	0.4010	0.4894	0.0025
Comp Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0003	0.0004	0.0000
Comp Mole Frac (AceticAcid)	0.0000	0.0000	0.1786	1.0000	0.1786	0.1279	0.0188	0.6201
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.7900	0.0000	0.2970	0.0000	0.2970	0.3052	0.3729	0.0002

Name	AA-Feed1	AA-feed2	F-vap1	AA-Makeup	Scr-Vap	Scr-Liq	Degas-feed	Degas-vap
Comp Mole Frac (VinylAcetate)	0.0000	0.0000	0.0411	0.0000	0.0036	0.0785	0.0982	0.2091
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0189	0.0000	0.0000	0.0399	0.1027	0.1776
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000	0.0586	0.0000	0.0528	0.0001	0.0001	0.0004
Comp Mole Frac (Glycerol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Ethylene)	0.0000	0.0000	0.4894	0.0000	0.4393	0.0043	0.0037	0.0216
Comp Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0004	0.0000	0.0004	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (AceticAcid)	1.0000	1.0000	0.0188	1.0000	0.1680	0.8769	0.7950	0.5895
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.0000	0.3729	0.0000	0.3360	0.0003	0.0003	0.0018

Name	Degas-liq	Recycl-AA1	AA-feed3	AA-solvent	R-outlet1	Recyl-AA1	Recycl-AA2	AA-Makeup2
Comp Mole Frac (VinylAcetate)	0.0759	0.0002	0.0001	0.0000	0.0591	0.0002	0.0002	0.0000
Comp Mole Frac (H2O)	0.0877	0.0004	0.0002	0.0001	0.0584	0.0004	0.0004	0.0000
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0479	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Glycerol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Ethylene)	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.4010	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0003	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (AceticAcid)	0.8361	0.9995	0.9997	0.9999	0.1279	0.9995	0.9995	1.0000
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.3052	0.0000	0.0000	0.0000

Name	Ext-Feed	Recycl-Ethylene	R-Ethylene1	Purge	R-Ethylene2	Degas-liq1	Purge-AA	Btm
Comp Mole Frac (VinylAcetate)	0.0230	0.0230	0.0230	0.0230	0.0230	0.0759	0.0002	0.0002
Comp Mole Frac (H2O)	0.0168	0.0168	0.0168	0.0168	0.0168	0.0877	0.0004	0.0004
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0478	0.0480	0.0480	0.0480	0.0480	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Glycerol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Ethylene)	0.3998	0.3994	0.3994	0.3994	0.3994	0.0002	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (CO2)	0.0003	0.0003	0.0003	0.0003	0.0003	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (AceticAcid)	0.2079	0.2076	0.2076	0.2076	0.2076	0.8361	0.9995	0.9995
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.3044	0.3048	0.3048	0.3048	0.3048	0.0000	0.0000	0.0000

Name	Top-Organic	Top-Water	Recycl-AA	VAM	Glycerol	Glycerol Feed
Comp Mole Frac (VinylAcetate)	0.6806	0.0329	0.0002	0.9977	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (H2O)	0.3173	0.9667	0.0004	0.0000	0.3997	0.0000
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Glycerol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.5996	1.0000
Comp Mole Frac (Ethylene)	0.0015	0.0000	0.0000	0.0022	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (AceticAcid)	0.0006	0.0004	0.9995	0.0000	0.0007	0.0000
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000