



**FACULTAD DE CIENCIAS**

**GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA**



TRABAJO FIN DE GRADO

**DISEÑO DE UN REACTOR PARA LA GASIFICACIÓN EN AGUA SUPERCRÍTICA DE  
SUBPRODUCTOS DEL RECICLADO DE FIBRAS DE CARBONO DE LA INDUSTRIA  
AERONÁUTICA**

**AUTOR:  
D. SALVADOR MARÍN DE ALBA**

**SEPTIEMBRE, 2023**



**FACULTAD DE CIENCIAS**

**GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA**



TRABAJO FIN DE GRADO

**DISEÑO DE UN REACTOR PARA LA GASIFICACIÓN EN AGUA SUPERCRÍTICA DE  
SUBPRODUCTOS DEL RECICLADO DE FIBRAS DE CARBONO DE LA INDUSTRIA  
AERONÁUTICA**

**AUTOR:**

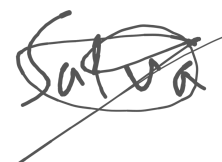
**D. SALVADOR MARÍN DE ALBA**

**TUTOR:**

**D. JUAN RAMÓN PORTELA MIGUELEZ**

**DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA Y TECNOLOGÍA DE ALIMENTOS**

**FIRMA DEL ALUMNO.**



Titulación: GIQ

---

Título: Diseño de un reactor para la gasificación en agua supercrítica de subproductos del reciclado de fibras de carbono de la industria aeronáutica (nueva propuesta)

---

Curso: 2022/2023

---

Tutor1: juanramon.portela@uca.es (INGENIERIA QUIMICA Y TECN. DE ALIMENTOS)

---

Carácter: Proyecto de Ingeniería Química

---

Descripción:

Los materiales compuestos reforzados con fibra de carbono presentan una interesante combinación de propiedades que los convierten en idóneos para la industria aeronáutica. En consecuencia, en los últimos años, su producción ha aumentado drásticamente, así como la cantidad de materiales de desecho. Se precisan de métodos eficientes para la recuperación de las fibras de carbono contenidas en dichos desechos, siendo el reciclado mediante hidrólisis hidrotérmica una opción interesante, pero genera una corriente líquida residual que es necesario gestionar.

El objetivo del TFG es el diseño de un reactor para valorizar mediante el proceso de gasificación en agua supercrítica la corriente acuosa resultante de la hidrólisis de resinas epoxi,. Dicha corriente proviene del tratamiento hidrotérmico de materiales compuestos, a partir del cual, se busca disolver las resinas epoxi y recuperar las fibras de carbono. Para representar el residuo se realizará una búsqueda de un compuesto modelo que pueda ser válido y del que se conozca su cinética GASC.

El reactor será de tipo tubular y se busca maximizar la producción de hidrógeno. Se pretende diseñar dicho reactor para trabajar con un caudal de alimentación entre 0,1 y 4 m<sup>3</sup>/h y conseguir un mínimo de eficacia del 98%.

Se seleccionarán las condiciones de reacción (presión, temperatura, tiempo de residencia, concentración del residuo), el material del reactor, se calculará el diámetro, longitud y espesor de la pared de dicho reactor, aislamiento térmico del reactor, y se dimensionarán los equipos auxiliares necesarios en la planta tales como bombas, precalentador de arranque y enfriador.

## Normativa básica

- Norma UNE 157001/2014. Criterios generales para la elaboración formal de los documentos que constituyen un proyecto técnico.
- Código ASME sección VIII, División I. Código de calderas y recipientes a presión (2007).
- Norma UNE-EN 9100:2018. Sistemas de gestión de calidad. Requisitos para las organizaciones de aviación, espaciales y defensa.
- Real Decreto 809/2021, de 21 de septiembre, por el que se aprueba el Reglamento de equipos a presión y sus instrucciones técnicas complementarias.

Alumno propuesto: Salvador Marín de Alba  
salva.marindeal@alum.uca.es

Curso: 2022/2023

Fecha: 18/11/2022 21:21:21

Es propuesta de alumno: SÍ; 1 Aceptada profesor: SÍ; Aceptada depto.: SÍ; Aceptada comisión: SÍ.

## **ÍNDICE GENERAL**

### **DOCUMENTO 1: MEMORIA**

1. RESUMEN
2. ABSTRACT
3. OBJETO. DESCRIPCIÓN DEL OBJETIVO DEL PROYECTO Y SU JUSTIFICACIÓN
4. ALCANCE
5. ANTECEDENTES
6. NORMAS Y REFERENCIAS
7. DEFINICIONES Y ABREVIATURAS
8. REQUISITOS DE DISEÑO
9. RESULTADOS FINALES
10. PLANIFICACIÓN

### **DOCUMENTO 2: ANEXOS**

1. CÁLCULO DE PROPIEDADES
2. CINÉTICA DE REACCIÓN
3. CÁLCULOS REFERIDOS AL REACTOR
4. DISEÑO DEL REACTOR
5. INTERCAMBIADOR DE CALOR (IC)
6. DIMENSIONAMIENTO DE EQUIPOS AUXILIARES
7. BIBLIOGRAFÍA

### **DOCUMENTO 3: PLANOS**

1. ALZADO DEL REACTOR-INCLINACIÓN
2. VISTA GENERAL ESQUINADA DEL REACTOR
3. VISTA AMPLIADA DEL GIRO DEL REACTOR
4. DETALLE DE LAS DIMENSIONES DE LAS CONDUCCIONES DEL REACTOR
5. VISTA EN PLANTA DE LA DISPOSICIÓN DEL AISLANTE TÉRMICO
6. VISTA GENERAL DE LA COMBINACIÓN REACTOR-IC
7. VISTA LATERAL DE LA COMBINACIÓN REACTOR-IC
8. DETALLE DE LAS DIMENSIONES DE LAS CONDUCCIONES DEL IC

### **DOCUMENTO 4: PLIEGO DE CONDICIONES**

1. DEFINICIÓN Y ALCANCE DEL PLIEGO DE CONDICIONES
2. CONDICIONES GENERALES FACULTATIVAS
3. CONDICIONES GENERALES ECONÓMICAS

4. CONDICIONES GENERALES LEGALES
5. CONDICIONES PARTICULARES

#### **DOCUMENTO 5: PRESUPUESTO**

1. OBJETO
2. CÁLCULO DE COSTES
3. PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN MATERIAL

#### **DOCUMENTO 6: ESTUDIO DE SEGURIDAD Y SALUD**

1. ANTECEDENTES
2. OBLIGATORIEDAD
3. EMPLAZAMIENTO DEL PROYECTO Y LA OBRA
4. SERVICIOS E INSTALACIONES AUXILIARES DURANTE LA OBRA
5. EQUIPAMIENTO DE OBRA
6. EVALUACIÓN DE RIESGOS
7. LEGISLACIÓN APLICADA EN EL PRESENTE ESTUDIO

# **DOCUMENTO 1:**

# **MEMORIA**

## **ÍNDICE MEMORIA**

1. RESUMEN .....	4
2. ABSTRACT .....	5
3. OBJETO. DESCRIPCIÓN DEL OBJETIVO DEL PROYECTO Y SU JUSTIFICACIÓN .....	6
4. ALCANCE .....	7
5. ANTECEDENTES .....	8
5.1 INTRODUCCIÓN A LOS MATERIALES COMPUESTOS .....	8
5.1.1 MERCADO GLOBAL DE LOS MATERIALES COMPUESTOS .....	8
5.1.2 ESTRUCTURA DE LOS MATERIALES COMPUESTOS .....	9
5.2 TECNOLOGÍAS DE TRATAMIENTO APLICABLES .....	10
5.3 CORRIENTE RESIDUAL DEL RECICLADO QUÍMICO .....	12
5.4 GASIFICACIÓN EN AGUA SUPERCRÍTICA .....	13
5.4.1 ASPECTOS ENERGÉTICOS .....	14
5.4.2 INCONVENIENTES DEL PROCESO .....	14
5.4.3 CINÉTICA DE REACCIÓN .....	14
6. NORMAS Y REFERENCIAS .....	15
6.1 NORMATIVA APLICADA .....	15
6.2 PROGRAMAS UTILIZADOS .....	15
6.3 REFERENCIAS .....	15
7. DEFINICIONES Y ABREVIATURAS .....	17
8. REQUISITOS DE DISEÑO .....	17
9. RESULTADOS FINALES .....	18
9.1 DESCRIPCIÓN DEL PROCESO .....	18
9.2 LOCALIZACIÓN .....	19
9.3 CINÉTICA DE REACCIÓN .....	20
9.3.1 SELECCIÓN DE LA CINÉTICA .....	20
9.3.2 PRODUCTOS DE REACCIÓN .....	23
9.4 CONDICIONES DE OPERACIÓN .....	27
9.4.1 CONCENTRACIÓN INICIAL .....	27
9.4.2 PRESIÓN .....	28
9.4.3 CAUDAL .....	29
9.4.4 TEMPERATURA .....	30
9.5 BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA .....	31
9.5.1 ENTALPÍA DE REACCIÓN .....	32
9.5.2 RESULTADOS DE LOS BALANCES .....	34
9.6 DISEÑO DEL REACTOR .....	36



9.6.1 SELECCIÓN DEL MATERIAL .....	36
9.6.2 SELECCIÓN DE LA TUBERÍA DEL REACTOR .....	36
9.6.3 SELECCIÓN DEL AISLANTE TÉRMICO .....	39
9.7 INTERCAMBIADOR DE CALOR .....	42
9.7.1 DISEÑO DEL IC .....	42
9.7.2 SELECCIÓN DEL AISLANTE .....	47
9.7.3 CALENTADOR .....	48
9.8 DISEÑO DE EQUIPOS AUXILIARES .....	48
9.8.1 TANQUES DE ALMACENAMIENTO .....	49
9.8.2 BOMBAS .....	49
10. PLANIFICACIÓN .....	50

## **1. RESUMEN**

Actualmente, nos encontramos en una época de gran innovación tecnológica promovida por un imponente desarrollo industrial, lo que supone el estudio y uso de materiales y tecnologías cada vez más eficientes. Esta innovación tiene lugar en todos los sectores industriales, por lo que uno con un volumen de ventas tan grande como el aeronáutico, no iba a quedarse atrás. La amplia búsqueda de materiales con elevados valores de resistencia y durabilidad, pero bajo peso, conduce a los materiales compuestos reforzados con fibra de carbono. Tanto es así, que se empezó a utilizar hace poco más de 25 años en programas militares y los aviones actuales contienen más de un 50% de sus elementos contruidos con este material.

El principal problema para la expansión de este material es su elevado coste y la mínima capacidad de reutilización que ofrecen las tecnologías de reciclaje actuales. Es de vital importancia para el sector aeronáutico el desarrollo de técnicas de reciclaje que permitan la reutilización de las fibras de carbono de estos materiales. El reciclado químico se postula como un candidato idóneo para el tratamiento de los materiales compuestos de matrices poliméricas reforzados con fibras de carbono, pero si se habla de la operación industrial, la corriente residual proveniente de la degradación de la matriz polimérica se vuelve un problema a tratar.

El objetivo del presente TFG es el diseño de un reactor para la gasificación en agua supercrítica de la corriente residual proveniente del reciclado químico de los materiales compuestos reforzados con fibra de carbono de la industria aeronáutica, así como los principales equipos auxiliares que forman parte de esta planta piloto. La corriente a tratar es el resultado de la degradación de la matriz polimérica mediante hidrólisis, por tanto, estará compuesta por la matriz despolimerizada en forma de monómeros en una corriente acuosa. El diseño del reactor tendrá lugar a partir del fenol como un compuesto modelo de la corriente de productos mencionada.

La planta proyectada tratará un caudal de 153 L/h, con una concentración inicial de fenol 0,2 M, hasta llegar a un porcentaje de eliminación del 98%. El reactor tubular diseñado cuenta con una capacidad de 458 L y está construido con tuberías de 2" de diámetro nominal de Inconel 625. El reactor trabajará a 250 bar de presión y entre 630-650 °C de temperatura para la eliminación de 24772 kg de fenol al año. Asimismo, la planta cuenta con la capacidad de generar al año 1388 kg de H<sub>2</sub> y 8890 kg de CH<sub>4</sub>, lo que permite que parte de la instalación sea autosuficiente desde el punto de vista energético.

## **2. ABSTRACT**

We are currently in an era of great technological innovation promoted by an impressive industrial development, which involves the study and use of increasingly efficient materials and technologies. This innovation is taking place in all industrial sectors, so one with such a large turnover as the aeronautical sector was not going to be left behind. The extensive search for materials with high strength and durability values, but low weight is converging on carbon fibre reinforced composites. So much so that it began to be used just over 25 years ago in military programmes, and today's aircraft have more than 50% of their components made of this material.

The main problem for the expansion of this material is its high cost and the minimal reusability offered by current recycling technologies. It is of vital importance for the aeronautical sector to develop recycling techniques that allow the reuse of the carbon fibres of these materials. Chemical recycling is postulated as a suitable candidate for the treatment of carbon fibre reinforced polymer matrix composite materials but, if we talk about the industrial operation, the waste stream coming from the degradation of the polymeric matrix becomes an issue to be dealt with.

The aim of this project is the design of a reactor for the gasification in supercritical water of the waste stream coming from the chemical recycling of carbon fibre reinforced composite materials from the aeronautical industry, as well as the main auxiliary equipment that is part of this pilot plant. The stream that is going to be treated is the result of the degradation of the polymeric matrix by hydrolysis, therefore, it will be composed of the depolymerized matrix in the form of monomers in an aqueous stream. The reactor design will be based on phenol as a model compound of the above product stream.

The planned plant will treat a flow rate of 153 L/h, with an initial phenol concentration of 0.2 M, up to a removal rate of 98%. The designed tubular reactor has a capacity of 458 L and is built with 2" nominal diameter pipes of Inconel 625. The reactor will work at 250 bar pressure and between 630-650 °C of temperature for the elimination of 24772 kg of phenol per year. The plant also has the capacity to generate 1388 kg of H<sub>2</sub> and 8890 kg of CH<sub>4</sub> per year, making part of the installation self-sufficient in energy terms.

### **3. OBJETO. DESCRIPCIÓN DEL OBJETIVO DEL PROYECTO Y SU JUSTIFICACIÓN**

El objetivo del presente Trabajo Fin de Grado es el diseño de un reactor y los equipos auxiliares principales para la valorización, mediante el proceso de gasificación en agua supercrítica, de una corriente acuosa resultante de la hidrólisis de resinas epoxi. Dicha corriente proviene del tratamiento hidrotérmico de materiales compuestos, a partir del cual, se busca disolver las resinas epoxi y recuperar las fibras de carbono.

El tratamiento hidrotérmico es una tecnología que ofrece resultados excelentes para el reciclaje de las fibras de carbono, pero produce una corriente residual resultante de la degradación de la matriz polimérica. Básicamente, la estructura de las resinas epoxi es una cadena de éteres de bisfenol y epiclorhidrina, por lo que la hidrólisis de la misma implica la ruptura de estos enlaces éter, lo que conduce a la formación de grupos hidroxilo en la estructura molecular de la resina y a la liberación de productos de degradación, siendo el principal el fenol. Aunque se necesitan estudios más detallados para comprender completamente la composición y las propiedades de los productos de la hidrólisis de las resinas epoxi, es bastante razonable utilizar el fenol como un compuesto modelo de la corriente de productos mencionada.

Actualmente, la gasificación en agua supercrítica de fenol es una de las técnicas más prometedoras para la eliminación del mismo. Existen múltiples estudios con esta tecnología que la sitúan como una solución factible para la eliminación de fenol a la par que se obtiene una corriente de productos con valor añadido. Es decir, la gasificación en agua supercrítica de fenol genera una corriente de productos gaseosos con valor energético, entre los que destacan el hidrógeno y el metano, que podría subsanar parte del gasto de operación.

La gasificación de materia carbonosa con agua supercrítica es una tecnología que presenta importantes ventajas frente al método tradicional con vapor. Por ejemplo, con esta tecnología se trabaja a temperaturas inferiores, reduciéndose así el gasto energético y los procesos de gasificación son más rápidos. Además, no se necesita eliminar la humedad de la biomasa y durante la operación no se producen cenizas. La dificultad a solventar que presenta esta tecnología es el cambio de escala, debido a las severas condiciones de presión y temperatura. Proyectos a escala de planta piloto sirven como nexo entre los buenos resultados a escala laboratorio y la construcción de una planta industrial.

#### **4. ALCANCE**

El alcance del presente proyecto incluye el diseño de un reactor, de tipo tubular, para la gasificación en agua supercrítica de subproductos de la hidrólisis de la matriz polimérica de materiales compuestos reforzados con fibra de carbono, utilizando fenol como compuesto modelo de la corriente, así como los equipos adicionales necesarios para el correcto funcionamiento del mismo. En concreto, se seleccionan las condiciones de operación adecuadas (concentración inicial de fenol, temperatura, presión, etc.) y se calcula el volumen del reactor necesario, acorde a los estudios cinéticos recogidos en la bibliografía, para alcanzar el objetivo impuesto de eliminación del fenol y la máxima producción de hidrógeno. Una vez llegado a este punto, se selecciona el material y las dimensiones del reactor (diámetro y longitud) óptimas para lograr los objetivos marcados. Se elige y calcula el espesor del aislante térmico de manera que pueda considerarse que el reactor trabaja en condiciones adiabáticas.

El diseño de un intercambiador de calor que precaliente la alimentación del reactor a partir del calor del efluente del mismo, así como el aislante térmico que necesitaría dicho intercambiador, forma parte de las competencias del presente proyecto. Además, se estimará la pérdida de carga en el sistema para calcular la potencia mínima que debe tener la bomba y, a partir de este valor y el caudal necesario, se elegirá la bomba más adecuada para la planta. Tras el precalentador se situará un calentador para que la corriente de alimentación alcance la temperatura de reacción. El dimensionamiento del calentador no entra dentro de las competencias del presente Trabajo Fin de Grado, pero sí el cálculo del calor que el mismo debe aportar para estimar su coste.

Se estudiará el máximo aprovechamiento del calor de la corriente de productos y la posibilidad de generar vapor de baja presión o agua caliente sanitaria a partir del mismo, pero en ningún caso, entra en las competencias del presente proyecto el dimensionamiento del intercambiador de calor necesario para ello. Una vez fría, la corriente de productos se despresuriza y pasa a un separador gas-líquido de donde sale la corriente de productos gaseosos. Tampoco se atenderá al diseño de este separador ni a las posteriores unidades de concentración de los distintos productos gaseosos.

## **5. ANTECEDENTES**

### **5.1 INTRODUCCIÓN A LOS MATERIALES COMPUESTOS**

Los materiales compuestos reforzados con fibra de carbono, CFRP por sus siglas en inglés, son un grupo de materiales altamente innovadores y versátiles que han revolucionado muchas industrias gracias a sus propiedades mecánicas y livianas excepcionales. Estos materiales están formados por la combinación de dos o más componentes diferentes, en la que una matriz polimérica se mezcla con fibras de carbono para crear una estructura homogénea con propiedades superiores a las de sus componentes individuales.

Los CFRP presentan una interesante combinación de propiedades como la resistencia a la corrosión, la durabilidad, la solidez, la baja dilatación térmica y la elevada relación resistencia-peso. Ofrecen ventajas claras que los convierten en sustitutos ideales de diversos materiales, como el aluminio, el granito y el acero inoxidable, siendo materiales ideales para multitud de industrias, como son la aeroespacial, aeronáutica, automotriz, deportiva y de construcción, entre otras. Su uso en la fabricación de componentes estructurales, como alas de aviones, ha permitido reducir el peso y aumentar la eficiencia y rendimiento de las mismas.

#### **5.1.1 MERCADO GLOBAL DE LOS MATERIALES COMPUESTOS**

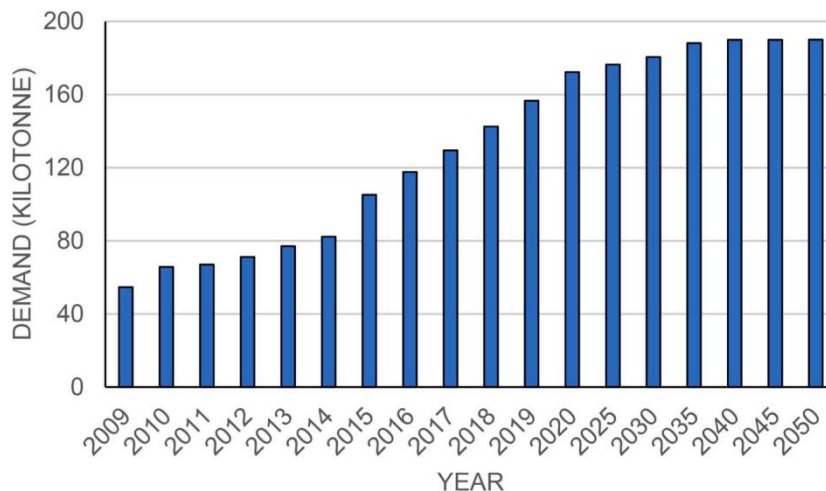
El mercado global de CFRP ha experimentado un crecimiento significativo en las últimas décadas debido a sus numerosas ventajas y aplicaciones en diversas industrias. Estos materiales se han convertido en la opción preferida para fabricantes y diseñadores que buscan materiales livianos pero altamente resistentes y duraderos.

En 2019, el tamaño del mercado europeo de materiales compuestos fue de, aproximadamente, 17.880 millones de dólares estadounidenses y se prevé una expansión de dicho mercado a una tasa de crecimiento compuesto del 7,5%. Como se muestra en la siguiente Figura 1, la demanda de CFRP se ha triplicado de 2010 a 2020 y se espera que supere los 190 millones de kilogramos en el año 2050.

El crecimiento del mercado de los CFRP ha sido impulsado por varios factores clave:

1. **Innovación tecnológica:** Avances en la tecnología de fabricación han permitido una mayor producción y una reducción de costos, lo que ha hecho que los materiales compuestos sean más accesibles para diversas industrias.
2. **Mayor conciencia ambiental:** Los CFRP se consideran más sostenibles que otros materiales tradicionales, como el acero y el aluminio, debido a su menor huella de carbono y su capacidad para reducir el consumo de energía en aplicaciones como el transporte.

3. Normativas más estrictas: Los estándares ambientales y las regulaciones sobre eficiencia y emisiones en varias industrias han presionado la demanda de materiales livianos y resistentes como los CFRP.



*Figura 1: Demanda de CFRP por año en millones de kilogramos, [1]*

Es evidente que los CFRP suponen un mercado enorme que crece a un ritmo muy elevado, algo que no ocurre con el reciclaje de los mismos. En 2015 en Reino Unido, casi el 98% de los componentes fuera de uso y residuos de la fabricación de materiales compuestos se enterraron en vertederos, es decir, el mercado de los materiales compuestos reforzados con fibra de carbono no para de crecer y prácticamente no existe sistema alguno de reciclaje de estos componentes.

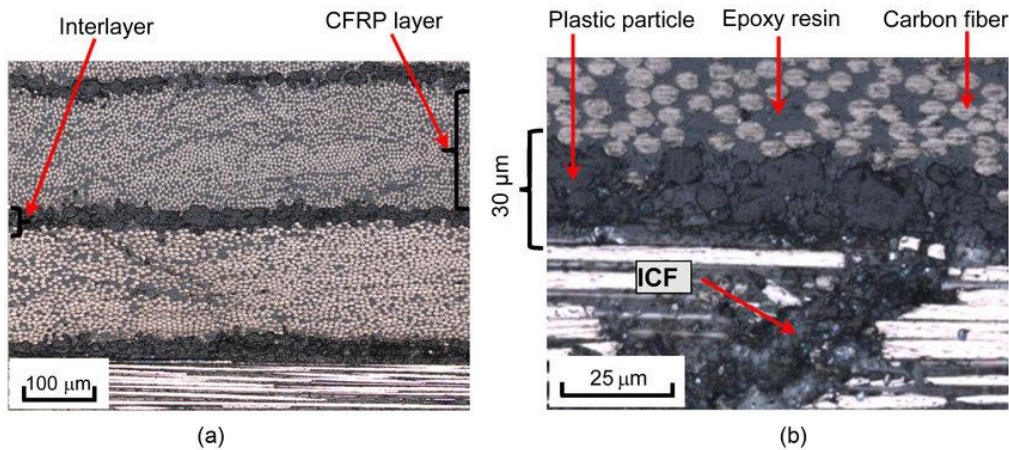
### **5.1.2 ESTRUCTURA DE LOS MATERIALES COMPUESTOS**

Los 3 principales componentes de los materiales compuestos son:

- Matriz: Parte continua y homogénea del material compuesto que rodea y sostiene a los otros componentes. Su función principal es transferir las cargas y proporcionar estabilidad dimensional.
- Refuerzo: Es la parte que proporciona la resistencia y las propiedades mecánicas al material compuesto. El refuerzo puede ser de diferentes tipos, como fibras de carbono o partículas, entre otros.
- Interfaz: Zona que conecta el refuerzo y la matriz. Es esencial una alta calidad de la interfaz para la resistencia y durabilidad del material compuesto.

Según la disposición de sus componentes, se distinguen diferentes tipos de materiales compuestos, como son los de partículas, de matriz reforzada, termoplásticos y laminados. Los materiales compuestos laminados son los más utilizados para condiciones extremas como las requeridas en las industrias aeroespacial y aeronáutica. Constan de capas o láminas de refuerzo, como fibra de vidrio o de carbono, unidas con una matriz de resina termoestable o termoplástica [2].

A continuación, se muestra en la Figura 2 una microfotografía de la estructura de un CFRP, en la que se aprecia, de forma clara, los principales componentes de estos materiales compuestos:



*Figura 2: Microestructura del laminado de un CFRP utilizado en una prueba de fatiga, [3]*

## 5.2 TECNOLOGÍAS DE TRATAMIENTO APLICABLES

El principal inconveniente de los materiales compuestos es que son difíciles de reciclar, sobre todo los reforzados con fibra de carbono debido a su gran estabilidad química y dureza. El valor comercial de los CFRP radica en la recuperación de fibras de carbono largas y de alto módulo con un valor intrínseco para su reutilización en posteriores aplicaciones de alta calidad. Actualmente, casi todo va al vertedero, de forma que se acumula como residuo algo con un alto costo de producción, sin recuperar nada de él. Además, la legislación obligará a reciclar estos materiales o se prohibirá en el futuro el uso de CFRP no reciclables. Es decir, es de vital importancia para sectores como el aeronáutico lograr convertir los residuos de estos compuestos en un recurso valioso y cerrar el ciclo de reciclaje.

El vertido y la incineración para recuperar parte de la energía incorporada son los métodos tradicionales de tratamiento de estos residuos, sin embargo, ni la incineración ni el vertido pueden clasificarse como reciclado, ya que no existe ninguna operación de recuperación mediante la cual los residuos puedan transformarse en productos o materiales para otros fines, es decir, se tratan de técnicas incompletas que no permiten cerrar el círculo de vida de los materiales. Actualmente, se estudian distintas técnicas para el reciclaje de los CFRP que ofrezcan productos con valor, las cuales se dividen en reciclado mecánico, térmico y químico [4]:

### –Reciclado mecánico

Se basa en el uso de técnicas de trituración, molienda, pulverización o fragmentación, de forma que se reduce el tamaño de los componentes del material compuesto primario a partículas con una longitud de entre 50 µm a 10 mm. Esta técnica permite separar las piezas de desecho resultantes mediante tamizado en productos en polvo (ricos en resina) y productos fibrosos (ricos en fibras). Este método es



adecuado para residuos limpios, no contaminados y de origen conocido, bajo estas condiciones el reciclaje mecánico permite recuperar tanto las fibras como las resinas sin utilizar ni producir materiales peligrosos.

El problema de esta técnica es el escaso potencial de reutilización de los productos, los reciclados en polvo no tienen cabida en los compuestos termoestables originales y, por su parte, los reciclados fibrosos tienen algunas posibilidades como materiales de refuerzo, pero presentan una degradación importante en sus propiedades mecánicas, por lo que las posibilidades de refabricación son también limitadas.

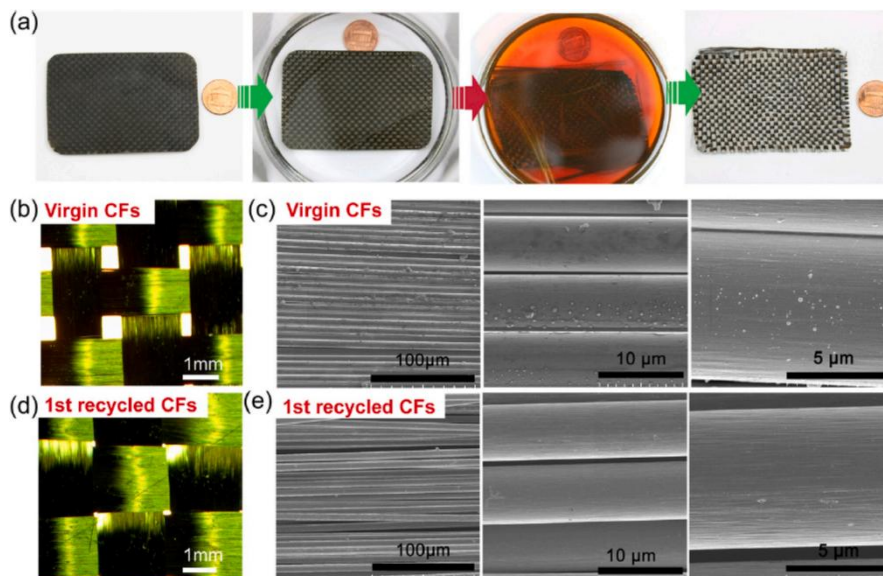
#### **–Reciclado térmico**

Estas técnicas buscan descomponer los residuos de materiales compuestos y la matriz de resina mediante el empleo de calor, recuperando así las fibras de carbono. Las técnicas de reciclado térmico más utilizadas son la pirólisis y el tratamiento en lecho fluidizado. El reciclado térmico es más complejo que el mecánico y se ve afectado por distintos factores, entre ellos la composición de la materia prima de desecho, el tipo de reactor y los parámetros del proceso, por lo que deben ajustarse a las características de la fibra y al tipo de compuesto. A pesar de que las fibras recuperadas tienen propiedades mecánicas similares a las vírgenes (entre un 4 y un 20% de disminución), se necesita trabajo de desarrollo para identificar cómo puede reprocesarse el material para convertirlo en nuevos productos rentables. Además, los productos pueden tener distintos grados de carbonización en las fibras recicladas, lo que limita las opciones de reutilización o se precisa de un tratamiento posterior para eliminarlas.

#### **–Reciclado químico**

Mediante un tratamiento químico se busca degradar la resina, de forma que pueden recuperarse las fibras limpias. La degradación de la resina se realiza con disolventes orgánicos como metanol, etanol, etc (solvólisis) o agua en condiciones subcríticas o supercríticas (hidrólisis). La solvólisis presenta el problema del empleo de productos químicos peligrosos y concentrados con el consecuente impacto medioambiental, por tanto, la hidrólisis se presenta como una alternativa al uso de estos disolventes. La hidrólisis en condiciones subcríticas o supercríticas soluciona el problema medioambiental asociado al uso de disolventes, pero se precisan de reactores caros que puedan soportar altas temperaturas y presiones. En comparación con las técnicas tradicionales de reciclado, la hidrólisis es una excelente alternativa para recuperar fibras, ya que proporciona altas propiedades mecánicas y longitud de fibra, además de un alto potencial de recuperación de la resina.

A continuación, se muestra en la Figura 3 el reciclado químico de las fibras de carbono y el resultado de dicha tratamiento, comparando las fibras recuperadas con fibras de carbono vírgenes:



*Figura 3: Recuperación de fibras de carbono de CFRP, mostrando (a) el proceso de reciclado y microfotografías de CF vírgenes (b) y recicladas (d), American Chemical Society [5]*

A pesar de los buenos resultados a escala de laboratorio, la principal limitación en el camino hacia su aplicación industrial es el escalado, si se habla de la operación industrial, la corriente residual proveniente de la degradación de la matriz polimérica se vuelve un problema a tratar. El reciclado químico se postula como un candidato idóneo para el tratamiento de los CFRP, pero se necesita de un tratamiento eficaz para eliminar dicha corriente residual.

### **5.3 CORRIENTE RESIDUAL DEL RECICLADO QUÍMICO**

En los CFRP de la industria aeronáutica, la matriz suele estar formada típicamente a partir de resinas epoxi debido a que tienen propiedades mecánicas superiores y mejor capacidad de adhesión a las fibras de carbono que el resto de opciones.

El proceso de fabricación de resinas epoxi implica la reacción química entre el bisfenol A y un agente de curado para formar una red tridimensional de polímeros. Esta reacción, conocida como reacción de curado o polimerización, ocurre entre los grupos epoxi presentes en el bisfenol A y los grupos funcionales del agente de curado. La hidrólisis de las resinas epoxi implica la formación de grupos hidroxilo en la cadena polimérica y la liberación de productos de degradación, como el fenol. Dado que el fenol es un compuesto que se encuentra comúnmente en la corriente resultante de la hidrólisis de las resinas epoxi, se puede utilizar como un compuesto modelo para estudiar y analizar dicha corriente. Al estudiar el comportamiento del fenol en las condiciones de hidrólisis y cómo se comporta en un proceso de reciclaje o tratamiento posterior, se pueden obtener conocimientos valiosos sobre la composición y las propiedades de la corriente de residuos y, a su vez, desarrollar estrategias para su manejo y recuperación. Las principales técnicas para la eliminación del fenol son la biodegradación u

oxidación del mismo. Sin embargo, una concentración de fenol superior a 20 mg/L conlleva una fuerte inhibición sobre los microorganismos y la oxidación con agentes muy oxidantes como el permanganato potásico o el peróxido de hidrógeno conlleva, en el caso del primero, la producción de otros residuos y un alto coste y, usando peróxido de hidrógeno, puede darse la acumulación del oxidante o incluso no conseguir una oxidación completa. Con todo esto, la gasificación en agua supercrítica de fenol gana enteros con respecto a los anteriores métodos.

## 5.4 GASIFICACIÓN EN AGUA SUPERCRÍTICA

La gasificación en agua supercrítica, GASC por sus siglas en español, de fenol puede ser una de las mejores técnicas para su eliminación debido a las grandes limitaciones del resto de métodos de eliminación de fenol y los excelentes resultados que ofrece en estudios a escala de laboratorio.

Cuando las condiciones de presión y temperatura se acercan a las del punto crítico del agua, 221 bar y 374 °C, las propiedades del líquido y del vapor se van acercando hasta que coinciden en el punto crítico. Una vez superado este punto solo existe una fase, fase supercrítica, en la que las propiedades son una combinación de las fases líquida y gas. En la siguiente Figura 4 se presenta el diagrama de fases del agua:

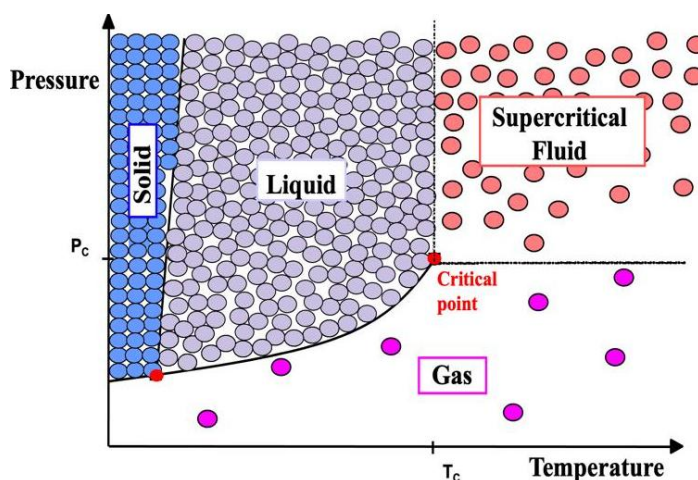


Figura 4: Diagrama de fases del agua [6]

El proceso de gasificación en agua supercrítica requiere equipos y reactores capaces de soportar altas presiones y temperaturas, lo que aumenta el coste de implementación de la misma. Sin embargo, ofrece resultados muy buenos para la eliminación de fenol y la gasificación completa es un proceso que genera únicamente productos gaseosos, además, con valor añadido para gases como el metano o el hidrógeno. Por tanto, se trata de una tecnología que no solo no genera residuos, sino que además permite la obtención de energía a partir de los productos de la eliminación de fenol.

### **5.4.1 ASPECTOS ENERGÉTICOS**

La reacción de GASC es ligeramente endotérmica, por lo que el funcionamiento autotérmico del reactor no es posible, pero el efluente abandonará el reactor a una temperatura muy elevada y puede utilizarse la misma para precalentar la alimentación. Es importante aprovechar la mayor parte del calor del efluente del reactor para que el tratamiento mediante GASC tenga un coste económico asumible y comparable con el de otras tecnologías.

### **5.4.2 INCONVENIENTES DEL PROCESO**

A pesar de todas las ventajas mencionadas, la GASC es una tecnología en desarrollo y presenta algunos retos tecnológicos que han impedido su aplicación a gran escala [6]. Los principales son:

- Requiere equipos y reactores que pueden soportar altas temperaturas y presiones, lo que aumenta el coste de los equipos y la operación.
- A pesar de ser efectiva a escala laboratorio, el escalado a niveles industriales puede ser un desafío.
- Aunque la GASC puede producir combustibles limpios, también requiere el suministro de energía externa en forma de calor para llevar a cabo la reacción. Si la fuente de energía no es renovable, el beneficio ambiental de la tecnología se reduciría considerablemente.

### **5.4.3 CINÉTICA DE REACCIÓN**

Tal y como se detallará en el capítulo 9.3, existen varios estudios tanto cualitativos como cuantitativos sobre la eficacia de la GASC de fenol y todos llevan a dos conclusiones generales. La GASC de fenol es un proceso que conlleva multitud de mecanismos de degradación y la influencia de estos en el proceso global depende de las condiciones de reacción. Esto quiere decir que las condiciones de reacción (presión y temperatura) influyen en gran medida en la cinética de degradación del fenol y la distribución de productos resultante. Por tanto, se seleccionarán las condiciones de reacción y la cinética del estudio que ofrezcan mayores velocidades de reacción y la mayor proporción de H<sub>2</sub> en la corriente de productos.

## **6. NORMAS Y REFERENCIAS**

### **6.1 NORMATIVA APLICADA**

- UNE 157001:2014, para la elaboración de documentos que conforman un proyecto.
- ASME B31.3 Process Piping 2018: Tuberías de refinerías y plantas químicas.
- ASTM B564-22, sobre especificaciones estándar para piezas forjadas en aleaciones de níquel.
- Guía técnica: diseño y cálculo del aislamiento térmico de conducciones, aparatos y equipos (2007)
- UNE-EN ISO 12241:2010: Aislamiento térmico para instalaciones industriales.
- Código ASME BPV (2010), Sección VIII, división 1, 2 y 3, para el diseño mecánico de equipos a presión.
- Código ASME BPV (2019), Sección II, división 3.
- Real Decreto 865/2003, del 4 de julio, por el que se establecen los criterios higiénico-sanitarios para la prevención y control de la legionelosis.
- Real Decreto 178/2021, de 23 de marzo, sobre el Reglamento de Instalaciones Térmicas en los Edificios.

### **6.2 PROGRAMAS UTILIZADOS**

Se ha hecho uso del software siguiente para la realización del presente proyecto:

- WPS Office® 2015: Se incluyen los paquetes de WPS Word y WPS Slide para la elaboración del documento y la presentación.
- Microsoft Excel® 2016 versión de estudiante: Empleado para la elaboración de tablas, gráficos y la mayoría de los cálculos.
- AutoCAD 2024® Licencia de estudiante: Para la elaboración de los planos de los equipos diseñados.
- Aspen Plus™ V11: Para la estimación de la entalpía de reacción y de las propiedades del fenol y los productos gaseosos.
- EDraw Max®: Para el diseño de algunas figuras, diagrama de flujo y diagrama de Gantt.
- CES EduPack®: Para obtener una vista general de los posibles aislantes térmicos.

### **6.3 REFERENCIAS**

- [1] Zhang, J., Chevali, V. S., Wang, H., & Wang, C. H. (2020). Current status of carbon fibre and carbon fibre composites recycling. Composites Part B: Engineering, 193. <https://doi.org/10.1016/J.COMPOSITESB.2020.108053>
- [2] Ciencia e ingeniería de los materiales, William D. Callister, Editorial Reverté, 2ª edición.

- [3] Sudarsono, S., & Ogi, K. (2017). Fatigue Behavior of Open-Holed CFRP Laminates with Initially Cut Fibers. *Open Journal of Composite Materials*, 07(01), 49–62. <https://doi.org/10.4236/OJCM.2017.71003>
- [4] Borjan, D., Knez, Ž., & Knez, M. (2021). Recycling of Carbon Fiber-Reinforced Composites—Difficulties and Future Perspectives. *Materials* 2021, Vol. 14, Page 4191, 14(15), 4191. <https://doi.org/10.3390/MA14154191>
- [5] Kuang, X., Zhou, Y., Shi, Q., Wang, T., & Qi, H. J. (2018). Recycling of Epoxy Thermoset and Composites via Good Solvent Assisted and Small Molecules Participated Exchange Reactions. *ACS Sustainable Chemistry and Engineering*, 6(7), 9189–9197. <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acssuschemeng.8b01538>
- [6] María Belén García Jarana (2009) “Estudio de los procesos de oxidación y gasificación en agua supercrítica aplicado al tratamiento de vertidos industriales” Tesis Doctoral. Universidad de Cádiz.
- [7] Libro del Web de Química del NIST. Visto Abril 21, 2023, de <https://webbook.nist.gov/chemistry/>
- [8] Huelsman, C. M., & Savage, P. E. (2013). Reaction pathways and kinetic modeling for phenol gasification in supercritical water. *The Journal of Supercritical Fluids*, 81, 200–209. <https://doi.org/10.1016/J.SUPFLU.2013.05.012>
- [9] Huelsman, C. M., & Savage, P. E. (2012). Intermediates and kinetics for phenol gasification in supercritical water. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 14(8), 2900–2910. <https://doi.org/10.1039/C2CP23910H>
- [10] Yong, T. L. K., & Matsumura, Y. (2014). Kinetics analysis of phenol and benzene decomposition in supercritical water. *The Journal of Supercritical Fluids*, 87, 73–82. <https://doi.org/10.1016/J.SUPFLU.2013.12.018>
- [11] Weiss-Hortala, E., Kruse, A., Ceccarelli, C., & Barna, R. (2010). Influence of phenol on glucose degradation during supercritical water gasification. *The Journal of Supercritical Fluids*, 53(1–3), 42–47. <https://doi.org/10.1016/J.SUPFLU.2010.01.004>
- [12] Goodwin, A. K., & Rorrer, G. L. (2008). Conversion of glucose to hydrogen-rich gas by supercritical water in a microchannel reactor. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 47(12), 4106–4114. [https://doi.org/10.1021/IE701725P/ASSET/IMAGES/IE-2007-01725P\\_M006.GIF](https://doi.org/10.1021/IE701725P/ASSET/IMAGES/IE-2007-01725P_M006.GIF)
- [13] Fernández, J. Pelaz (2016). Regeneración con fluidos supercríticos de fibras de carbón activas saturadas con fenol. <https://doi.org/10.14201/GREDOS.133008>
- [14] <https://www.specialmetals.com> Visto Abril 15, 2023
- [15] <https://www.tubinox.com/catalogo/category/4-tuberias> Visto Abril 18, 2023
- [16] Resistencia térmica. Visto Mayo 8, 2023, de <https://stacbond.com/resistencia-termica/>
- [17] <https://www.isover.es> Visto Mayo 13, 2023
- [18] Transferencia de Calor y Masa, Yunus A. Cengel, Editorial Mc Graw Hill, 4ª edición.
- [19] Mecánica de fluidos en ingeniería, Salvador de las Heras Jimenez, Editor Universidad Politécnica de Cataluña, 1ª edición.

## **7. DEFINICIONES Y ABREVIATURAS**

A continuación se muestran todas las abreviaturas usadas durante la elaboración del presente proyecto:

- ACS: Agua Caliente Sanitaria
- ANSI: American National Standards Institute
- ASME: American Society of Mechanical Engineers
- CFRP: Materiales compuestos reforzados con fibras de carbono
- GASC: Gasificación en Agua Supercrítica
- IC: Intercambiador de calor
- LMTD: Diferencia de Temperatura Media Logarítmica
- RFP: Reactor Flujo Pistón
- TFG: Trabajo Fin de Grado

## **8. REQUISITOS DE DISEÑO**

En el presente Trabajo Fin de Grado, se realiza el diseño de los equipos indicados, usando como guía la propuesta aceptada por la Comisión de Trabajos de Fin de Grado de la Facultad de Ciencias y la normativa vigente en térmicos de seguridad en el trabajo y legislación medioambiental. La planta deberá cumplir los siguientes requisitos:

- La planta será diseñada para que pueda tratar mediante gasificación en agua supercrítica un caudal de alimentación de entre 100 y 4000 L/h y conseguir un mínimo de eficacia de eliminación del fenol del 98%.
- Las condiciones de operación serán las más adecuadas para lograr una alta velocidad de reacción y una distribución de productos ventajosa, es decir, con una alta fracción de H<sub>2</sub>.
- Aprovechar el calor del efluente del reactor para precalentar la alimentación y, en el caso de que esta primera abandone el intercambiador de calor a una temperatura aún elevada, seguir aprovechando este calor para la generación de vapor de baja presión o agua caliente sanitaria.
- El diámetro nominal máximo de las conducciones será de 2", es decir, 60,32 mm de diámetro externo.
- El reactor será de tipo tubular (RFP) y operará a una temperatura máxima de 650 °C para reducir el desgaste térmico de los materiales y el coste energético de la operación. Además, este debe estar aislado térmicamente hasta el punto de poder considerar el proceso como adiabático.
- La temperatura superficial del aislante térmico del reactor y del intercambiador de calor será, como máximo, de 60 °C tal como viene regido por la norma UNE-EN ISO 12241:2010, sobre aislamiento térmico para equipos de edificación e instalaciones industriales.

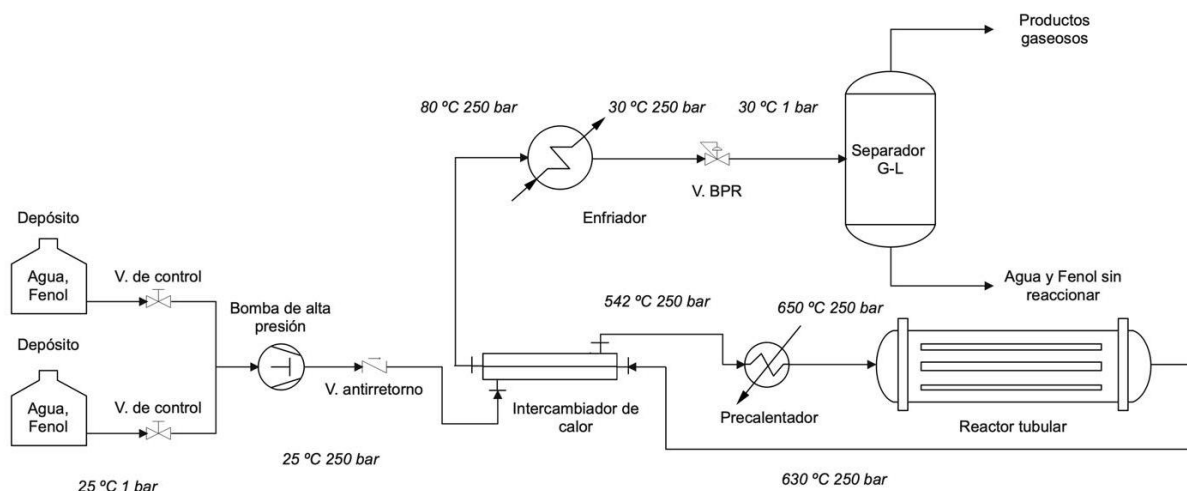
## 9. RESULTADOS FINALES

En este apartado se verán expuestas y justificadas todas las decisiones que se han tomado durante el presente proyecto para el diseño de un reactor para la GASC de subproductos del reciclado de fibras de carbono de la industria aeronáutica, tomando el fenol como compuesto modelo de la materia orgánica de dicha corriente.

Las propiedades de las distintas especies químicas implicadas en la reacción de GASC de fenol se obtuvieron a partir de simulación en el software “Aspen Plus” o, en el caso de que estuviesen disponibles, en la web del *National Institute of Standards and Technology* (NIST) [7].

### 9.1 DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

El diagrama de flujo simplificado del proceso para la GASC de subproductos del reciclado de fibras de carbono de la industria aeronáutica se muestra en la Figura 5:



*Figura 5: Diagrama de flujo simplificado del proceso*

El tanque de alimentación, en el que se encuentra la disolución de agua y fenol en la concentración necesaria, se dispone por duplicado, de forma que ante cualquier fallo en la línea de alimentación, no exista la obligación de parar la operación. La selección del tanque que proporcionará la corriente de alimentación se realiza mediante un sistema de dos válvulas de compuerta, una a la salida de cada tanque. Dicha corriente de alimentación es impulsada mediante una bomba de alta presión hasta un intercambiador de calor, que servirá para precalentar la alimentación aprovechando el calor del efluente del reactor.

La alimentación abandona el IC a 542 °C y pasa a través de un calentador (caldera o resistencia eléctrica) para alcanzar la temperatura de entrada al reactor, es decir, 650 °C. El efluente del reactor abandona el mismo a 630 °C y se utiliza para precalentar la alimentación en el IC como ya se



mencionó. La corriente de productos abandona el intercambiador a 80 °C y pasa por otro IC para terminar de aprovechar el calor de dicha corriente mediante la generación de ACS.

Por último, la corriente de productos se despresuriza tras pasar por una válvula BPR y entra en un separador G-L, obteniéndose una corriente con los productos gaseosos y otra con agua y fenol en concentración mínima.

## **9.2 LOCALIZACIÓN**

La planta que se dimensiona en el presente TFG tiene como objetivo solucionar el principal problema de una prometedora tecnología de reciclaje y reutilización de CFRP de la industria aeronáutica, es decir, tratar la corriente de residuos que genera dicha técnica. El Polígono Industrial Bahía de Cádiz (véase la Figura 6) situado en el Puerto de Santa María, Cádiz, es uno de los enclaves donde se sitúa el Parque Tecnológico TecnoBahía, parque industrial que cuenta con multitud de empresas dedicadas al sector aeronáutico, como son “Airbus”, “Airtificial”, “GECI” o “Aerotecnic Composites”, entre otras. Incluso cuenta con una subestación eléctrica para asegurar el abastecimiento eléctrico de dicho parque científico-tecnológico.



*Figura 6: Vista satélite de la ubicación de la planta, Google Earth*

Se trata de un emplazamiento ideal en el que podría llevarse a cabo el estudio de esta tecnología de tratamiento de residuos, así como el tratamiento hidrotérmico de los CFRP, seguido de la GASC de la corriente de desecho a escala industrial en un futuro. La ubicación seleccionada garantiza disponer de

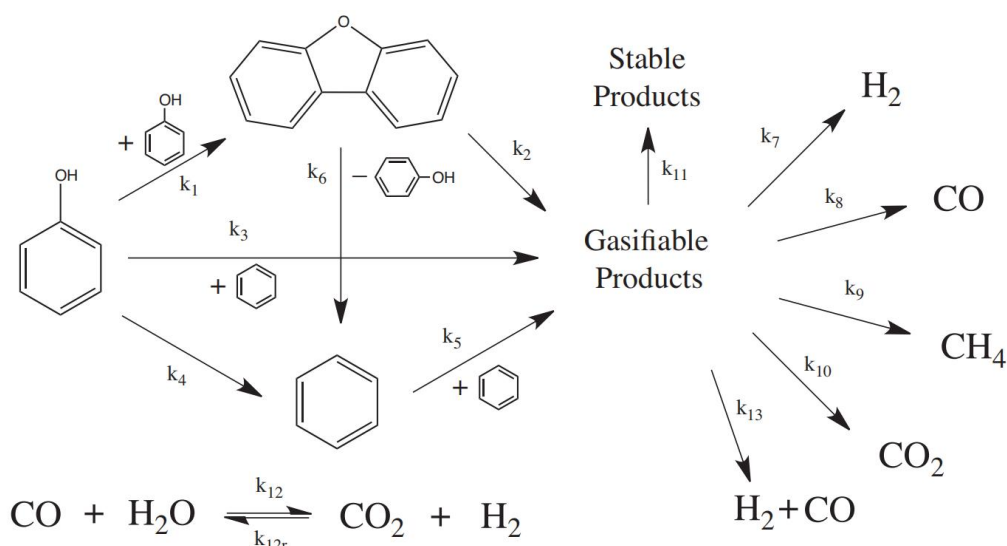
las acometidas necesarias de electricidad, agua, etc. La empresa con mayor probabilidad de acoger la planta piloto diseñada en el presente proyecto es “Titania” (enmarcada en rojo en la anterior Figura 6), la cual lidera el proyecto de reciclado por hidrólisis del que forma parte la UCA.

### 9.3 CINÉTICA DE REACCIÓN

#### 9.3.1 SELECCIÓN DE LA CINÉTICA

El primer paso no es otro que reunir distintos estudios de GASC de fenol y los mecanismos de reacción propuesto por los autores. La GASC es un proceso de complejo estudio, por lo que es de esperar que distintos autores, con distintos reactores y condiciones de reacción, sugieran mecanismos y cinéticas muy distintas entre sí. Son estudios con gran rigurosidad, por lo que los productos observados, así como compuestos intermedios, sí serán bastante parecidos (salvo grandes diferencias en las condiciones de reacción) pero, los mecanismos y cinéticas que mejor se ajusten en un caso, pueden no representar a otros estudios que se hayan llevado a cabo en condiciones distintas. Por tanto, la cinética seleccionada para el diseño del reactor en el presente TFG, procederá del artículo en el que se hayan ensayado las condiciones más similares posibles, es decir, un reactor tubular en el que se produzca la descomposición completa del fenol hasta productos gaseosos, primándose la producción de hidrógeno.

Todos los autores concuerdan en que el mecanismo de descomposición del fenol en estas condiciones (GASC) es muy complejo e involucra un gran número de reacciones. Huelsman y Savage [8] proponen el mecanismo de la Figura 7:



*Figura 7: Esquema simplificado propuesto por Huelsman y Savage [8]*

El mecanismo de descomposición del fenol mediante GASC presente en la anterior Figura 7 es bastante complejo y es de esperar que el mismo dependa de las condiciones de reacción. El tipo de

reactor, presión, temperatura, presencia de catalizador y concentración del reactivo afectan en gran medida al resultado del proceso de GASC.

Huelsman y Savage [9] comentan que la temperatura es extremadamente importante en el proceso de GASC. A 500 °C se obtuvieron conversiones muy bajas del fenol y poca producción gas, siendo la mayor parte de este CO y CO<sub>2</sub>. Esto sugiere que la energía térmica no es suficiente para romper los compuestos líquidos intermedios, limitando así la formación de CH<sub>4</sub> y H<sub>2</sub>. Al aumentar la temperatura los enlaces de los compuestos intermedios son más fáciles de romper, lo cual se traduce en un aumento de las fracciones de CH<sub>4</sub> y H<sub>2</sub>. Por debajo de los 600 °C la producción de hidrógeno es mínima.

A continuación, se muestra la Tabla 1, donde se expondrán distintos artículos y cinéticas que fueron revisadas durante las primeras etapas del presente proyecto.

*Tabla 1: Resumen preliminar de los artículos estudiados*

Autor	Tipo de reactor	Tª estudiada (°C)	Nº de mecanismos	Catalizador
Pinkard (2018)	Tubular continuo	370-450	1	-
Weiss-Hortala (2010)	Tubular continuo	400-560	-	KHCO <sub>3</sub>
Yong (2014)	Discontinuo	370-450	1	-
Goodwin (2009)	Discontinuo	600-720	1	KHCO <sub>3</sub>
Huelsman (2012)	Tubular discontinuo	500-700	2	-
Huelsman (2013)	Tubular discontinio	500-700	13	-

Yong [10] trabaja con reactor en continuo de 1 mm de diámetro interno en condiciones supercríticas (25 MPa 370-450 °C con tiempos entre 0,5-100 s), sin embargo, estas temperaturas no abarcan el rango que interesa para la producción de H<sub>2</sub>. Ocurre lo mismo para los casos de Pinkard y Weiss-Hortala [11], estudios realizados a temperaturas demasiado bajas.

Huelsman y Savage [8] proponen, además del mecanismo de reacción presente en la anterior Figura 7, valores numéricos para todas las constantes representadas, generando de esta forma un mecanismo de reacción completo con 13 etapas, sin embargo, es un cálculo bastante tedioso por lo que, en principio, se descarta como modelo cinético y se buscan otras opciones.

En el Anexo 2 se utilizan las principales cinéticas de gasificación de la bibliografía para construir una hoja Excel que permita construir gráficas comparativas y determinar las condiciones de operación necesarias para alcanzar una conversión deseada. A continuación, se muestra la Figura 8 con una comparativa de la conversión esperada en función del tiempo para cada una de las cinéticas de la Tabla 1, estudiadas todas a 650 °C:

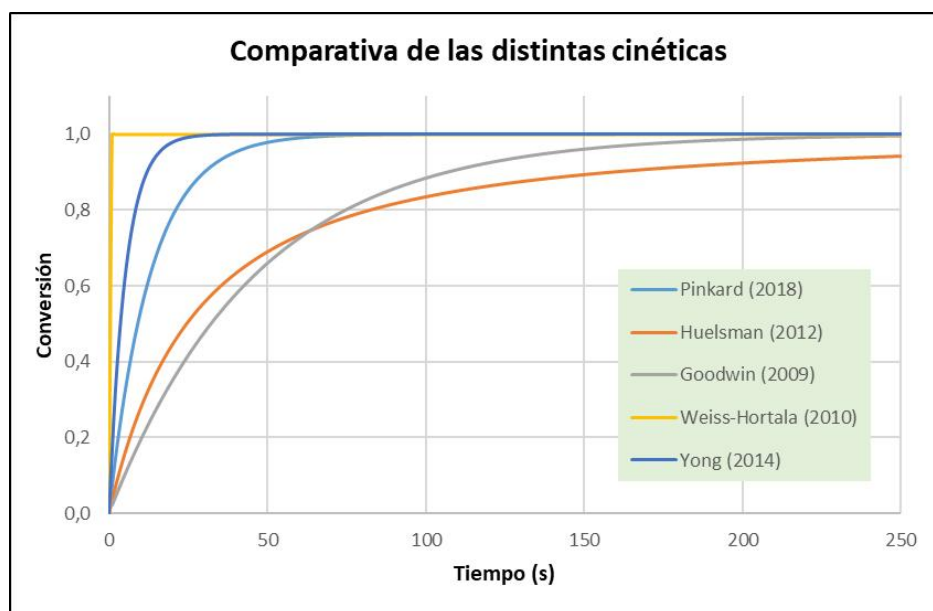


Figura 8: Comparativa de la conversión predicha por las distintas cinéticas consideradas inicialmente para la GASC de fenol

Aquellas cinéticas provenientes de estudios a temperaturas más bajas se desmarcan completamente de la tendencia de los dos realizados por encima de los 600 °C (temperatura a la que la producción de H<sub>2</sub> comienza a darse de forma apreciable). Tras estos descartes solo quedan las cinéticas propuestas por Goodwin [12] y Huelsman [9] las cuales, a pesar de haberse estudiado en reactores discontinuos, son las más adecuadas por el rango de temperaturas ensayado. Finalmente, debido a que el reactor ensayado por Goodwin se estudiaba en presencia de KHCO<sub>3</sub> como catalizador, queda descartado.

Se trabajará, por tanto, con la cinética propuesta por Huelsman y Savage [9] para la desaparición del fenol hasta la formación de productos gaseosos, la cual está basada en dos mecanismos, descomposición térmica y descomposición hidrotérmica, cuyos parámetros cinéticos aparecen recogidos en la Tabla 2:

$$-\frac{d[C_6H_5OH]}{dt} = k_1(T)[C_6H_5OH]^a[H_2O]^b + k_2(T)[C_6H_5OH]^c[H_2O]^d \quad (1)$$

Tabla 2: Parámetros cinéticos propuestos por Huelsman y Savage [9]

<i>a</i>	1.73
<i>b</i>	-16.60
<i>c</i>	0.92
<i>d</i>	1.39
<i>A</i> <sub>1</sub> (mol <sup>15.87</sup> L <sup>-15.87</sup> s <sup>-1</sup> )	1.92 × 10 <sup>15</sup>
<i>A</i> <sub>2</sub> (mol <sup>1.47</sup> L <sup>-1.47</sup> s <sup>-1</sup> )	4.42 × 10 <sup>11</sup>
<i>E</i> <sub>a1</sub> (kJ mol <sup>-1</sup> )	125
<i>E</i> <sub>a2</sub> (kJ mol <sup>-1</sup> )	280
<i>R</i> <sup>2</sup>	0.985

De esta forma quedan acotadas la presión y la concentración inicial de fenol al rango ensayado por los autores de la cinética en cuestión. Huelsman y Savage [9], al igual que la mayoría de autores, ensayaron en condiciones de presión entre 25 y 34,5 MPa y valores de concentración de fenol entre 0,02 y 0,2 M.

### 9.3.2 PRODUCTOS DE REACCIÓN

En el esquema de reacción de la anterior Figura 7 se muestra que los principales productos de la GASC de fenol son gases y otros productos estables que se obtienen en ensayos a temperaturas inferiores a 600 °C.

Huelsman y Savage [8] proponen que el benceno y el dibenzofurano son los únicos productos primarios y su formación se da cuando solo existe fenol y agua. La GASC de estos productos primarios desemboca en la formación de más benceno y productos gaseosos como el H<sub>2</sub> y la consecución completa del proceso conlleva la aparición de únicamente productos gaseosos, entre los que destacan H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, CO y CO<sub>2</sub>.

Esta idea fue apoyada por Jennifer Pelaz [13] que estudió mediante espectrometría de masas los componentes presentes en el efluente gaseoso resultante de la GASC de fenol. El primer paso del estudio de las corrientes gaseosas generadas es la identificación de las especies que se producen en la gasificación, es decir, el análisis cualitativo y, una vez identificadas, se podrá conocer la concentración de cada una de ellas en la mezcla gaseosa producida. Como se muestra en la Figura 9, los espectros de masas de los gases generados en la GASC de fenol presentan cuatro picos correspondientes a los mismos gases observados por Huelsman y Savge, por lo que estos son los productos mayoritarios de la reacción completa:

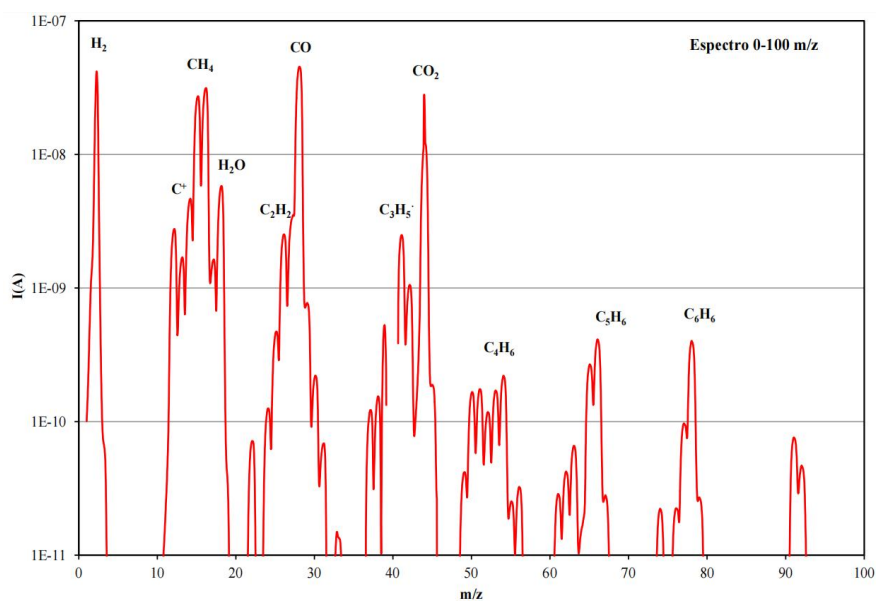


Figura 9: Espectros de masas de los gases generados en la gasificación del fenol a 700 °C [13]

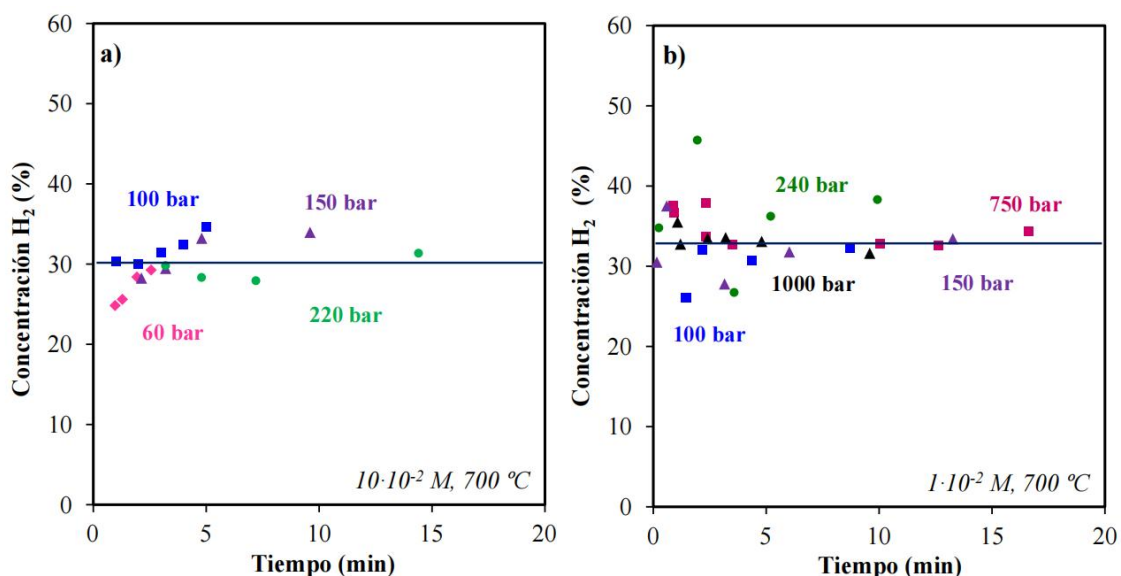
Una vez definidos los productos gaseosos mayoritarios se atenderá al porcentaje de cada uno en el efluente gaseoso. Huelsman y Savage [9] presentan una tabla resumen con los resultados principales de sus ensayos de GASC de fenol, tabla en la que se encuentra la fracción que se observó de cada uno de estos cuatro gases en dicho producto gaseoso. Reagrupando aquellas experiencias realizadas en las condiciones más similares a las del reactor que se pretende diseñar, es decir, a 650 °C y 25 MPa (más adelante se atenderá a las razones por las que la alimentación se presentará en estas condiciones) y realizando la media aritmética de los distintos valores se obtiene la Tabla 3:

*Tabla 3: Fracciones gaseosas experimentales para 0,2 M de fenol, Huelsman y Savage [9]*

Temperatura (°C)	Tiempo (min)	Conversión	H <sub>2</sub>	CO	CH <sub>4</sub>	CO <sub>2</sub>
600	60	0,51	0,277	0,223	0,227	0,303
700	30	0,99	0,33	0,06	0,29	0,32
700	60	1	0,32	0,02	0,33	0,33

En la anterior se evidencia lo expuesto por múltiples artículos y es que las fracciones de los productos dependen de la temperatura de gasificación. El reactor trabajará en condiciones intermedias a las mostradas en la Tabla 3 por lo que las fracciones de los productos también se encontrarán entre estos valores.

Jennifer Pelaz realizó un análisis cuantitativo bastante similar al de la anterior tabla y como resultado de dicho estudio, presentó distintas gráficas con la evolución de la fracción de un gas en el producto gaseoso en función del tiempo y de la presión de operación. En la Figura 10 se muestran los resultados de los ensayos para la fracción molar de hidrógeno.



*Figura 10: Efecto de la presión y del tiempo de residencia en la concentración de H<sub>2</sub> para una concentración inicial de fenol de a) 0,1 M y b) 0,01 M, J. Pelaz [13]*

En la Figura 10 se observa que la concentración de H<sub>2</sub> no varía de forma apreciable con la presión ni con el tiempo de residencia, manteniéndose siempre entre 25 y 35%. Además, según avanza la reacción (mayor tiempo de residencia) los valores son aún más cercanos al 30%, por tanto, esta será la fracción que se considerará para el H<sub>2</sub> en la corriente gaseosa de salida.

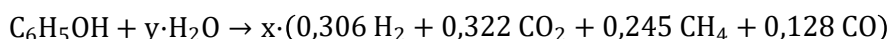
En el documento “Anexo 2” se exponen las gráficas correspondientes al resto de gases y el estudio de las mismas para llegar a las conclusiones que se presentarán a continuación en la Tabla 4. Finalmente, el único problema es que la suma de las fracciones consideradas para cada gas a partir del estudio de J. Pelaz [13] es menor del 100% por lo que se escalarán de forma proporcional a este valor.

*Tabla 4: Fracciones gaseosas esperadas de la GASC de fenol en las condiciones más similares a las de reacción basadas en los resultados de Huelsman y Savage y Jennifer Pelaz*

Estudio de los resultados	H <sub>2</sub>	CO	CH <sub>4</sub>	CO <sub>2</sub>	% Total
Huelsman y Savage (2012)	0,3	0,13	0,26	0,31	100%
Jennifer Pelaz (2016)	0,3	0,12	0,22	0,32	96%
	0,313	0,125	0,229	0,333	100%
Resultado promedio	0,306	0,128	0,245	0,322	100%

Una vez conocidas las fracciones molares de los distintos gases como producto final, es necesario estimar cuanta cantidad de gas se genera. El objetivo es conocer el número de moles que se generan de gas por cada mol consumido de fenol y, de esta forma, los moles generados de cada gas. No puede establecerse una relación simple entre los productos gaseosos y los reactivos (agua y fenol) por la multitud de reacciones que tienen lugar y la complejidad que presenta el estudio de una reacción en condiciones tan severas de presión y temperatura.

La ecuación estequiométrica para el consumo de un mol de fenol debe parecerse a la que se presenta a continuación:



Siendo:

- y: coeficiente estequiométrico del agua

- x: moles de gas generados

El balance molar a cada elemento resultaría en:

$$C \rightarrow 6 = x \cdot (0,322 + 0,245 + 0,128) \rightarrow 6 = 0,695x$$

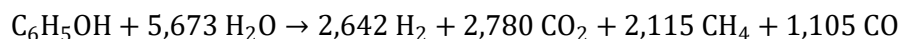
$$O \rightarrow 1 + y = x \cdot (0,322 \cdot 2 + 0,128) \rightarrow 1 + y = 0,773x$$

$$H \rightarrow 6 + 2y = x \cdot (0,306 \cdot 2 + 0,245 \cdot 4) \rightarrow 6 + 2y = 1,590x$$

De esta forma, se obtendría un sistema de 3 ecuaciones con 2 incógnitas y ninguna de las ecuaciones es combinación de las otras, por lo que se trata de un sistema incompatible, siendo imposible resolverlo completamente. El objetivo es encontrar valores de ‘x’ e ‘y’ que ofrezcan resultados

similares a ambos lados de las igualdades para obtener una solución de compromiso que, aunque no resuelva el sistema generado, ofrezca resultados válidos para la estequiometría de la reacción.

A continuación, se muestra la ecuación global obtenida tras varias suposiciones de valores para estas variables (Anexo 2, apartado 2.2):



El error en cuanto al balance de masa se obtiene de la siguiente forma:

$$\frac{|\text{masa de productos} - \text{masa de reactivos}|}{\text{masa de reactivos}} \cdot 100 = \frac{|192,377 - 196,224|}{196,224} \cdot 100 = 1,96\%$$

Un error del 1,96% es bastante pequeño, sobre todo para estudios experimentales en condiciones tan severas, de forma que los métodos analíticos carecen de gran precisión. Además, solo se han considerado en términos cuantitativos a los productos mayoritarios de la GASC del fenol, por lo que de haber contabilizado todos los productos, el error sería aún menor.

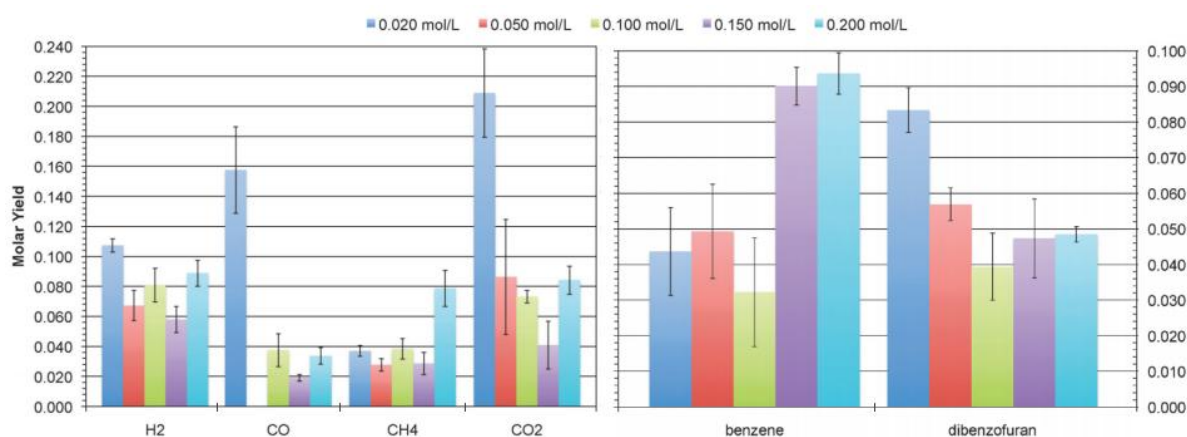
Finalmente, deben atenderse a los productos no gasificados, ya que la conversión no es completa. Huelsman y Savage [9] basaron su cinética para la GASC de fenol en la variación de la concentración de fenol, es decir, la conversión del mismo, por lo que es de esperar que tras una conversión del 98%, en el efluente del reactor se encuentre un 2% de los moles de fenol iniciales. Se considerará que los productos intermedios mayoritarios, como son el benceno y el dibenzofurano, no aparecerán en cantidades apreciables en la corriente que abandona el reactor, ya que se estudia la conversión completa del fenol hasta productos gaseosos.



## 9.4 CONDICIONES DE OPERACIÓN

### 9.4.1 CONCENTRACIÓN INICIAL

La concentración inicial de fenol puede influir en los resultados de la GASC si hay reacciones que no son de primer orden, esto es algo que pasa en el caso en estudio, puesto que la cinética propuesta por Huelsman y Savage [9] incluye dos mecanismos diferentes de desaparición del fenol con, además, órdenes de reacción diferentes para este compuesto. Desde un punto de vista tecnológico, son deseables concentraciones altas porque suelen reducir los costes de capital y de explotación. Si la concentración de la materia prima es muy baja, se requiere más tiempo de procesado para obtener la misma cantidad absoluta de producto.



*Figura 11: Efecto de la concentración de fenol en los rendimientos de cada gas y los componentes líquidos mayoritarios de la GASC de fenol, Huelsman y Savage [9]*

La anterior Figura 11 se formó con ensayos a 600 °C por lo que la reacción no se daba completamente y los rendimientos gaseosos son, por tanto, menores. Se puede observar que a concentraciones muy bajas de fenol los rendimientos de CO y CO<sub>2</sub> son muy altos, probablemente por el aumento de reacciones de combustión, mientras que el rendimiento molar de H<sub>2</sub> no parece verse muy afectado por los cambios en la concentración inicial de fenol y el de CH<sub>4</sub> parece aumentar ligeramente. El resultado de aumentar la concentración inicial de fenol es un gas más rico en H<sub>2</sub> y CH<sub>4</sub>, un resultado favorable para la comercialización del proceso.

Atendiendo a los productos líquidos obtenidos, se observa un mínimo en el rendimiento de los mismos para una concentración 0,1 M de fenol. Esto es algo que se explica a partir de la cinética que proponen los autores, basada en dos mecanismos, uno que prima para concentraciones bajas de fenol y otro a las altas. Pasado este punto, un aumento en la concentración inicial provoca un aumento en la formación de los productos líquidos intermedios, destacando la formación de benceno. Huelsman y Savage [9] estudiaron la GASC de benceno como parte del proceso de desaparición del fenol y observaron que a partir de la misma se obtienen solo productos gaseosos, por lo que una mayor fracción de benceno

durante el transcurso de la reacción no afectará a la distribución de productos gaseosos si la reacción se da de forma completa.

Con todo esto, se trabajará con una concentración inicial de fenol de 0,2 mol/L, puesto que no se han realizado ensayos a mayor concentración y, por tanto, no existe la certeza de que la reacción transcurra completamente hasta la formación exclusiva de productos gaseosos si se sigue aumentando la concentración inicial de fenol.

## 9.4.2 PRESIÓN

Huelsman y Savage [9] hablan de un aumento de la producción de H<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub> al aumentar la presión, sin embargo, el aumento en la producción de estos gases no es muy significativo, por lo que será importante considerar otros factores como la velocidad de reacción.

Atendiendo a la cinética seleccionada (ecuación 1), es evidente que uno de los dos mecanismos de reacción se encuentra claramente inhibido a altas concentraciones de agua. Puesto que el agua es el propio medio de reacción, su concentración está definida por las condiciones de reacción, siendo la presión un fuerte condicionante.

$$-\frac{d[C_6H_5OH]}{dt} = k_1(T)[C_6H_5OH]^{1,73}[H_2O]^{-16,6} + k_2(T)[C_6H_5OH]^{0,92}[H_2O]^{1,39} \quad (1)$$

El orden de reacción del agua en el primer mecanismo de descomposición del fenol es bastante negativo, de forma que actúa como un fuerte inhibidor para este mecanismo. A medida que aumenta la presión, aumenta la densidad del agua y, por tanto, mayor es la concentración molar de la misma, de forma que la velocidad de reacción será menor a presiones más altas. Esto es algo que se evidencia en la siguiente Figura 12:

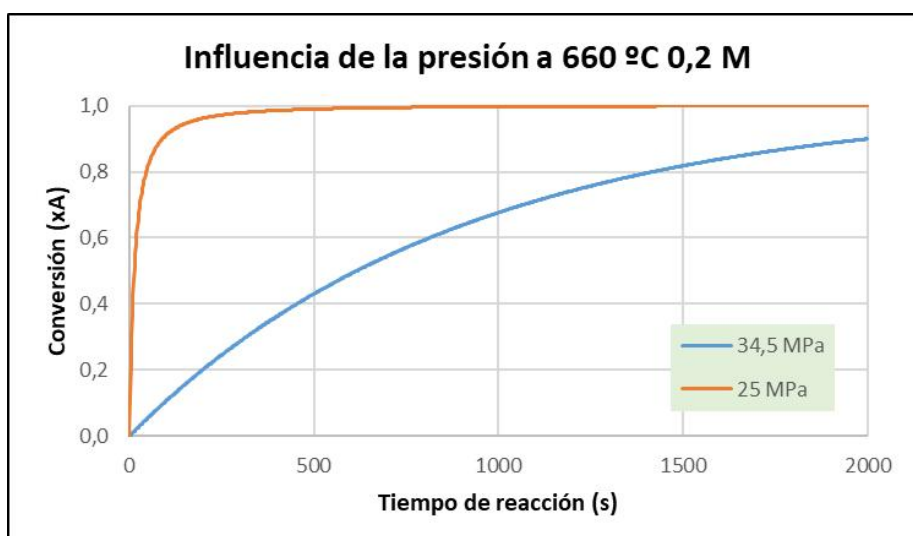
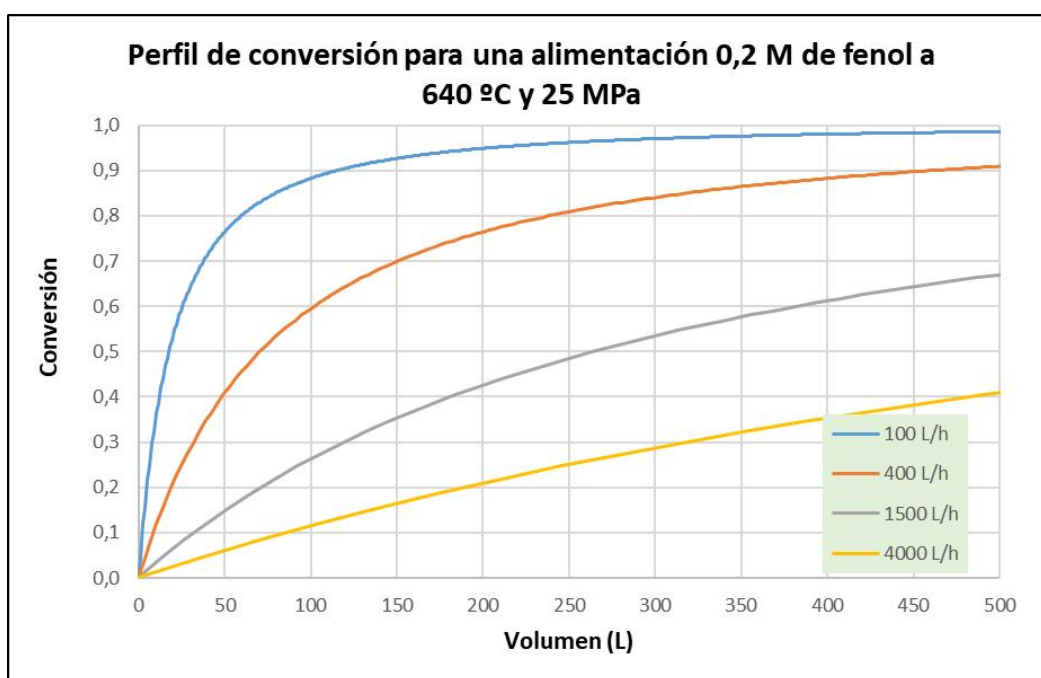


Figura 12: Efecto de la presión sobre la velocidad de reacción

En la anterior Figura 12 se observa que la diferencia en términos de tiempo de reacción necesario para una conversión dada es abismal entre ambas curvas, por lo que trabajar a una presión menor es bastante ventajoso en cuanto a la velocidad de reacción. Otros motivos para no trabajar a presiones excesivamente altas son el desgaste al equipo y la necesidad de un mayor espesor de pared o materiales más costosos para soportar dicha presión. Por tanto, el reactor del presente TFG trabajará a 25 MPa, ya que el ligero aumento en la fracción de H<sub>2</sub> no compensa el gran coste adicional que supone que el reactor funcione a una presión superior.

### 9.4.3 CAUDAL

El reactor que se pretende construir es para una planta escala piloto, por lo que su tamaño no puede ser excesivamente elevado. Además, el caudal volumétrico de operación aumenta más de 15 veces en las condiciones de reacción, de forma que un caudal de 100 L/h en la alimentación, se corresponde con 1593 L/h en el interior del reactor. En la Figura 13 se muestra el perfil de conversión en función del volumen del reactor para distintos caudales de operación:



*Figura 13: Perfil de conversión en el interior del reactor para distintos caudales de operación*

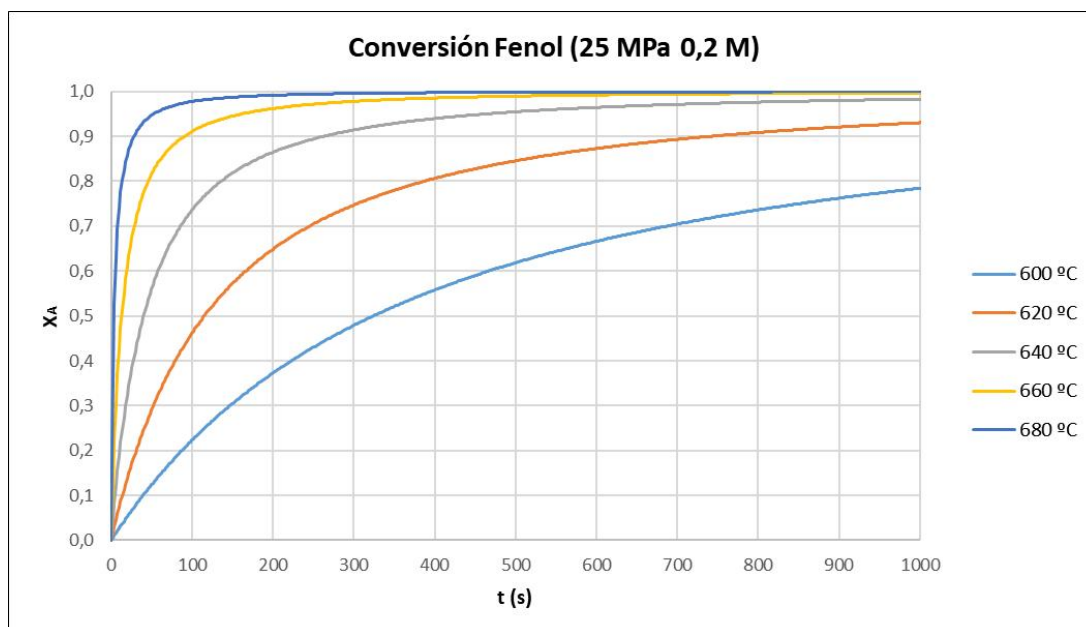
En la anterior Figura 13 se observa que se necesitaría un reactor muy grande para poder tratar un caudal relativamente pequeño (por ej. de 400 L/h). Además, el diámetro nominal máximo del reactor es de 2", de modo que la longitud necesaria sería enorme y, por tanto, inviable para una planta piloto. A pesar de que se busca la mayor productividad, es un reactor a escala de planta piloto, de forma que el principal objetivo del mismo es verificar que la reacción se da de forma correcta y se obtiene un producto con una concentración muy baja en el residuo (fenol) y alta en productos gaseosos, así como los requerimientos de operación y desgaste de los equipos. Si dicho reactor se llevase a escala

industrial, muy probablemente se requiera de temperatura de operación superior, que permita aumentar en gran medida el caudal de operación sin que el reactor sea desmesuradamente grande.

Aún no se conoce el diámetro de las conducciones del reactor, por lo que se fijará la longitud máxima del reactor en 400 metros y, una vez seleccionado el diámetro de dichas conducciones, se establecerá el caudal de operación.

#### 9.4.4 TEMPERATURA

La temperatura de reacción es un parámetro importantísimo para la velocidad de reacción y la distribución de productos. Es tan determinante que otros autores que realizaban ensayos a temperaturas más bajas, encontraban cinéticas muy diferentes a la Huelsman y Savage [9]. En la Figura 14 se muestra el avance de la reacción para distintas temperaturas dentro del rango de estudio:



*Figura 14: Conversión de fenol en un reactor isoterma en función de la temperatura*

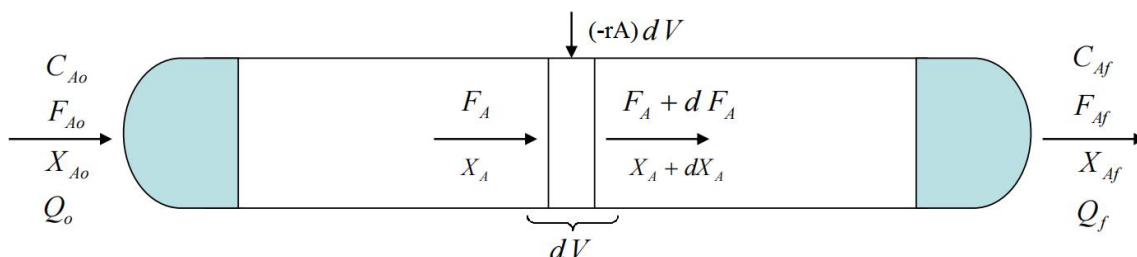
En la anterior Figura 14 se observa lo mencionado anteriormente, la temperatura influye en gran medida en el tiempo de reacción. Resulta evidente atendiendo a la gráfica mencionada que el reactor trabajará a una temperatura superior a 620 °C, ya para esta temperatura apenas se alcanza el 92% de conversión en 1000 segundos. Si bien es cierto que 640 °C parece una posible solución, se trata de un reactor isoterma, mientras que el del presente proyecto trabajará de forma adiabática y la reacción es ligeramente endotérmica. Con todo esto, la temperatura de alimentación al mismo deberá ser también superior a 640 °C para que la velocidad de reacción sea suficiente para permitir la operación con un caudal aceptable (superior a 100 L/h).

## 9.5 BALANCES DE MATERIA Y ENERGÍA

Conforme a los requisitos de diseño, el reactor del presente TFG será de tipo tubular, por lo que se admitirá que el comportamiento del mismo se corresponde con el modelo de reactor flujo en pistón (RFP). Se realiza un balance de materia a un RFP para obtener la ecuación de diseño del reactor y, a partir de esta, poder llevar a cabo el cálculo de sus parámetros de diseño.

Para el estudio de un reactor que funciona de forma adiabática, o para conocer el perfil de refrigeración deseado, se requiere de una resolución conjunta de los balances de materia y energía del mismo. Las propiedades de la corriente varían con el transcurso de una reacción al verse modificada la temperatura. En el caso de la GASC de fenol, esta se considera ligeramente endotérmica, por lo que las propiedades de la corriente deberán ajustarse a medida que progresa la reacción.

El balance de materia a un RFP debe realizarse sobre un elemento diferencial de volumen,  $dV$ , en la dirección axial al mismo. Dicho diferencial de volumen será una porción del reactor real con la misma área transversal (sección del reactor) y una longitud diferencial (por eso se habla de diferencial de volumen). Posteriormente, se realiza una integral que recoja todos esos diferenciales de volumen desde la entrada al reactor hasta la salida del mismo.



*Figura 15: Balance de materia a un elemento diferencial de volumen de un RFP*

A partir del esquema de la Figura 15 se obtiene la siguiente expresión:

$$F_A = F_A + dF_A + (-r_A)dV$$

Reagrupando términos y tomando integrales en los diferenciales se llega a la ecuación 2:

$$\frac{\tau}{C_{A0}} = \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} \tag{2}$$

La velocidad de reacción viene definida por la anteriormente presentada ecuación 1:

$$-\frac{d[C_6H_5OH]}{dt} = k_1(T)[C_6H_5OH]^{1,73}[H_2O]^{-16,6} + k_2(T)[C_6H_5OH]^{0,92}[H_2O]^{1,39}$$

Para el caso de una reacción con un solo reactivo, o de dos con el mismo orden de reacción, resolver la integral sería bastante sencillo. Sin embargo, en la cinética propuesta por Huelsman y Savage [9] se presentan dos mecanismos de descomposición del fenol (descomposición térmica e hidrotérmica), lo que complica el cálculo. Además, los órdenes parciales de los reactivos son muy diferentes entre sí,

dificultando de esta forma la agrupación de términos como constantes para la integral. En el Anexo 3 se desarrolla la resolución de la ecuación 2 mediante métodos numéricos, en concreto, por el método de Euler:

$$C_{A_n} = C_{A_{n-1}} - (-r_{A_{n-1}})d\tau \quad (3)$$

Para estudiar el comportamiento adiabático del reactor se utiliza la ecuación 3, pero debe atenderse al balance de energía (BE) para determinar la temperatura de la corriente para cada incremento de tiempo. El balance de energía para un RFP presenta la misma estructura que el de materia y a partir del desarrollo del mismo (véase Anexo 3) se obtiene la ecuación 4:

$$T_f = T_0 + \frac{(-\Delta H_r)F_{A_0}(x_A - x_{A_0})}{-v_A \cdot m_T \cdot \bar{c}_p} \quad (4)$$

Siendo:

$T_f$ : temperatura final (°C)

$T_0$ : temperatura inicial (°C)

$-\Delta H_r$ : entalpía molar de reacción (kJ/mol)

$F_{A_0}$ : caudal molar de fenol (mol/s)

$m_T$ : caudal másico total (g/s)

$C_p$ : capacidad calorífica promedio (kJ/g·°C)

$-v_A$ : diferencia estequiométrica entre reactivos y productos

Siendo la entalpía de reacción,  $-\Delta H_r$ , el único valor no conocido.

### 9.5.1 ENTALPÍA DE REACCIÓN

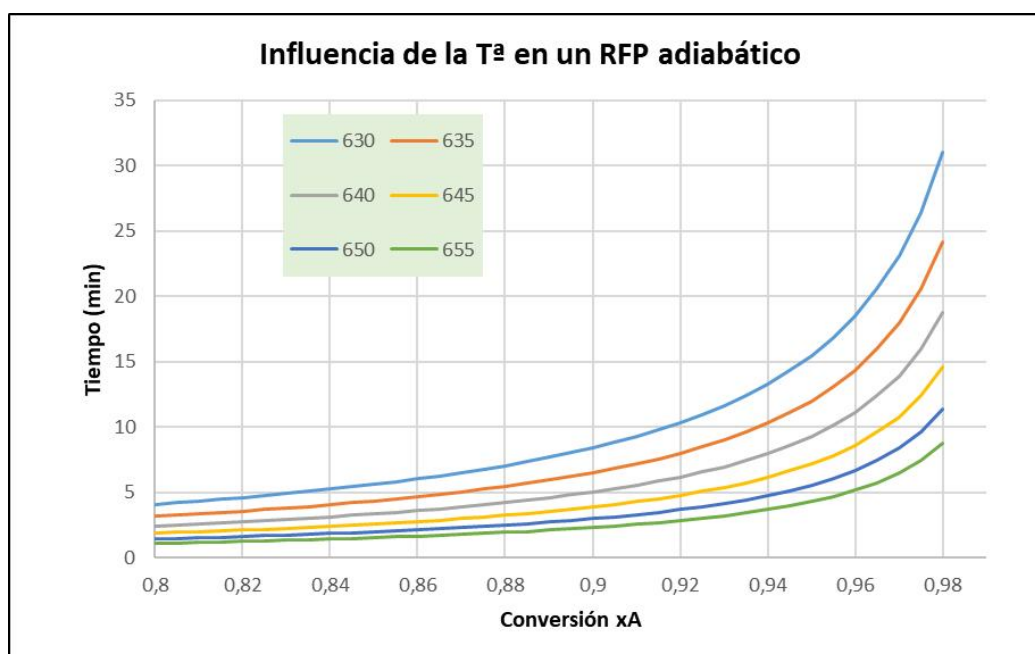
Dado que no se han encontrado datos publicados para el valor de la entalpía de reacción de la GASC de fenol, para el presente TFG se han estudiado las siguientes alternativas para su estimación:

1. Calcularla a través de un ciclo de Hess. Para poder completar dicho ciclo sería necesario conocer entalpías de reactivos y productos mayoritarios en las condiciones de reacción.
2. Obtenerla mediante un programa de simulación. Una alternativa es simular la reacción global en un reactor estequiométrico y conseguir que el programa utilizado ofrezca una estimación del calor de reacción.
3. Determinarlo experimentalmente. Se necesitaría un reactor discontinuo donde llevar a cabo la reacción de forma controlada y medir cuánto baja la temperatura en el fluido, es decir, cuánto calor se retira del medio. No es algo sencillo de montar y menos por las condiciones del proceso, sería más apropiado para un proyecto con una mayor componente experimental, por lo que queda descartada esta opción.

Finalmente, las opciones 1 y 2 también fueron descartadas, la primera por falta de datos y la segunda porque la entalpía obtenida a partir del simulador era demasiado elevada y predecía un descenso en la temperatura de la corriente de casi 50 °C. En el Anexo 3 se desarrolla la obtención y estudio de la entalpía a partir del simulador Aspen Plus.

En base a toda la bibliografía consultada, teniendo en cuenta que Huelsman [9] y otros autores catalogan la GASC de fenol como una reacción ligeramente endotérmica, que el aislamiento no será perfecto y que el reactor es bastante largo, una suposición lógica sería que se observe una diferencia de temperatura entre la alimentación y el efluente del reactor de unos 20 °C y, por tanto, se estudiará trabajar con una alimentación entre 630 y 650 °C admitiendo que abandona el reactor a 20 °C menos. Para ello, se resuelven de forma conjunta BM y BE del sistema, fijando que el efluente se encuentre a 20 °C menos que la alimentación. Este cálculo se ha realizado con la función “Buscar objetivo” en Excel para obtener el valor de  $\Delta H$  que implique una diferencia entre la entrada y salida del reactor de 20 °C para cada temperatura estudiada (véase Anexo 3).

A continuación, se muestran los resultados mediante la Figura 16 y la Tabla 5:



*Figura 16: Influencia de la temperatura de alimentación un RFP adiabático*

*Tabla 5: Resultados de la influencia de la temperatura en un RFP adiabático*

$T^a$ inicial (°C)	$\Delta H$ (kJ/mol)	$\tau$ (min)	$\Delta\tau/\Delta T$ (min/°C)
630	300,2	30,82	-
635	298,6	23,99	1,366
640	297,2	18,67	1,064
645	295,6	14,51	0,832
650	294,6	11,27	0,648
655	293,6	8,78	0,498

En la última columna de la Tabla 5 se observa que con cada aumento de temperatura se reduce la ganancia, es decir, cada incremento de temperatura produce una menor disminución del tiempo de residencia que la que provocaba el incremento de temperatura anterior. Sin embargo, la disminución del tiempo de reacción necesario sigue siendo considerable y más aún si se tienen en cuenta las características del reactor. Como se fijó en las especificaciones de diseño un diámetro nominal máximo del reactor de 60,32 mm, el diámetro interno del reactor será bastante pequeño, de forma que un aumento de cientos de litros en dicho reactor puede volverlo totalmente inviable debido a su excesiva longitud.

Por esta razón, la temperatura de la alimentación del reactor será de 650 °C, ya que esta se fijó como la temperatura más alta permisible en los requisitos de diseño con el fin de evitar desgaste térmico en los materiales y costes energéticos desorbitados. Además, queda definida la entalpía de reacción como 294,6 kJ/mol para garantizar la disminución de 20 °C de la temperatura de la alimentación.

## 9.5.2 RESULTADOS DE LOS BALANCES

En el presente apartado se dispondrán los resultados finales del reactor para las condiciones de operación seleccionadas. Para la resolución de los balances de materia y energía se ha construido un simulador del reactor en una hoja de cálculo en Excel, cuyo funcionamiento se desarrolla y ejemplifica en el Anexo 3. En la Tabla 6 se muestran los datos iniciales necesarios para la resolución de las ecuaciones anteriores:

*Tabla 6: Valores iniciales para la resolución de BM y BE*

<b>Datos iniciales del reactor</b>		
<b>Variable</b>	<b>Simbología</b>	<b>Valor</b>
Temperatura inicial (°C)	$T_0$	650
Entalpía molar de reacción (kJ/mol)	$\Delta H_r$	294,6
Concentración inicial de fenol (M)	$[C_6H_5OH]_0$	0,2
Caudal fuera del reactor (L/s)	$Q_v$	153
Caudal másico (g/s)	$m_T$	43,3
Caudal molar de fenol (mol/s)	$F_{A0}$	0,01
Factor preexponencial 1 (M/s)*	$K_{01}$	1,92E+15
Factor preexponencial 2 (M/s)*	$K_{02}$	4,42E+11
Energía de activación 1 (kJ/mol)	$E_{a1}$	125
Energía de activación 2 (kJ/mol)	$E_{a2}$	280
Orden parcial $C_6H_5OH$ (1)	$a$	1,73
Orden parcial $H_2O$ (1)	$b$	-16,6
Orden parcial $C_6H_5OH$ (2)	$c$	0,92
Orden parcial $H_2O$ (2)	$d$	1,39

*\*Las unidades de los factores preexponenciales son  $M^{-(a+b-1)}/s$  y  $M^{-(c+d-1)}/s$  respectivamente.*



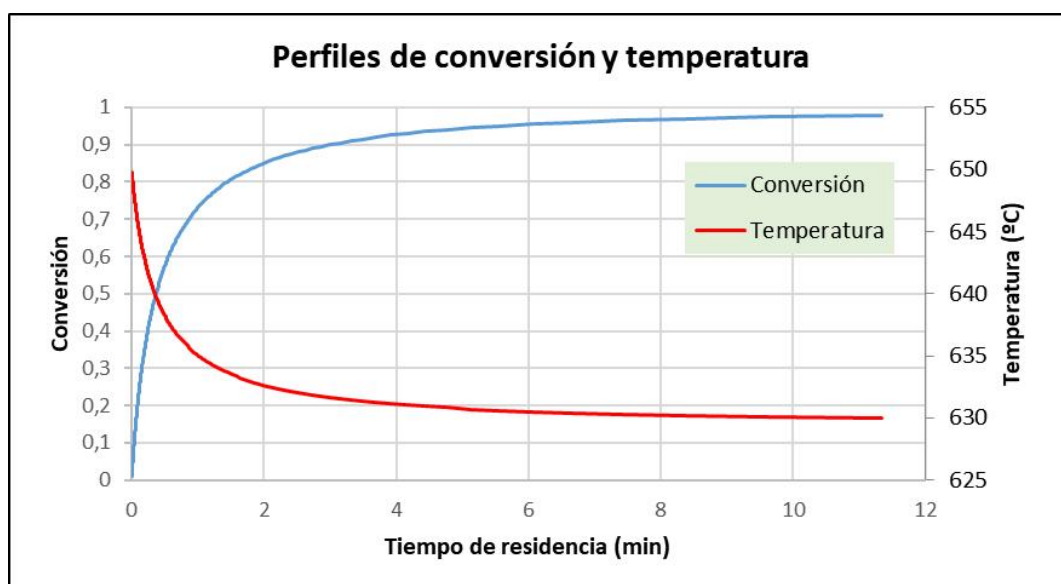
Como se observa en la Tabla 6 el caudal de operación será de 153 L/h, decisión que se explica en el apartado 9.6 del presente documento. La resolución de las ecuaciones 1, 3 y 4 a partir de los datos de la Tabla 6, permite obtener los resultados que se muestran a continuación:

*Tabla 7: Resultado resolución conjunta BM y BE del reactor*

Resultados finales del reactor		
Variable	Simbología	Valor
Temperatura inicial (°C)	$T_0$	650
Temperatura final (°C)	$T_f$	630
Concentración fenol salida (M)	$[C_6H_5OH]$	0,0004
Conversión obtenida	$x_A$	0,98
Tiempo espacial del reactor (min)	$\tau$	11,27
Masa de fenol eliminada (kg/año)	$Q_m$	24726,3

*Tabla 8: Caudal másico de productos*

Caudal de productos (ton/año)					
H <sub>2</sub> O	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OH	H <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>	CO	CO <sub>2</sub>
1313,3	0,505	1,388	8,890	8,128	32,13



*Figura 17: Perfiles de conversión y temperatura en el interior del reactor diseñado*

## **9.6 DISEÑO DEL REACTOR**

### **9.6.1 SELECCIÓN DEL MATERIAL**

Dada las características del proceso de GASC, es necesario contar con equipos preparados para operar en condiciones de alta presión y temperatura. Debido también a la naturaleza de este proceso hay que prestar especial atención a los problemas de corrosión, ya que estos reducen aún más el abanico de materiales que cumplen con los requisitos necesarios. Todas estas necesidades han motivado la selección de Inconel 625 para la construcción del reactor, entre otras opciones de interés (véase el Anexo 4). El Inconel 625 es una aleación de níquel excepcionalmente resistente a la corrosión y a la oxidación y que cuenta con excelentes propiedades mecánicas incluso a 650 °C y 250 bar [14]. Por todas estas razones, y a pesar de que esta aleación es la más cara, su uso está justificado no solo para la construcción del reactor, sino también para el intercambiador de calor que, como se mostró en el diagrama de flujo, se utilizará en la instalación para aprovechar el calor del efluente del reactor.

### **9.6.2 SELECCIÓN DE LA TUBERÍA DEL REACTOR**

El reactor que se pretende diseñar en el presente proyecto cuenta con una longitud de 400 metros, pero el volumen del mismo, y el caudal de operación, dependen del diámetro de sus conducciones, así como del espesor de estas. Al tratarse de un RFP debe cumplirse la hipótesis del modelo y que se trate de un sistema con una mezcla perfecta en dirección radial y nula en dirección axial. Una forma de verificar que esta aproximación es válida es calcular el valor del número de Reynolds (Re) y que este sea turbulento, ya que en este régimen el perfil de velocidades es bastante plano en la mayor parte de la sección transversal del reactor.

Para los flujos en conducciones circulares, el régimen es turbulento si el Re es mayor de 4000. Sin embargo, se buscará que el Re sea superior a 10000 para que la idealidad de RFP sea lo más correcta posible. La expresión para calcular dicho parámetro es la siguiente:

$$Re = \frac{4 \cdot \rho \cdot Q}{d \cdot \mu \cdot \pi} \geq 10000$$

La combinación entre el diámetro interno y el caudal de operación define el Re, que debe ser mayor a 10000 y el diámetro interno dependerá del diámetro externo y del espesor. Estas dos variables están normalizadas, por lo que se deben estudiar únicamente las dimensiones de tuberías comerciales hechas de Inconel 625. Por tanto, debe calcularse el espesor necesario para una tubería de Inconel 625 de cierto diámetro y verificar que se comercialicen conducciones con mayor espesor que el necesario. En caso de que existan tuberías comerciales con el espesor suficiente para ese tamaño, se seleccionará el caudal de operación que necesite de un reactor de 400 metros y, por último, se comprueba que el Re es superior a 10000.

Para el cálculo del espesor necesario se atenderá al código ASME B31.3 Process Piping (2018):

$$t_m = \left( \frac{PD}{2(SEW + PY)} + c \right) M \quad (5)$$

El proceso seguido para la obtención de las distintas variables presentes en la ecuación 5 se encuentra detallado al completo en el Anexo 2. Tras el estudio de varios diámetros posibles junto con el caudal de operación que soportaría un reactor de 400 metros con el tamaño de conducción en cuestión, se ha seleccionado un diámetro de 2" (60,32 mm), a partir del cual se construye la Tabla 9 con los resultados obtenidos:

*Tabla 9: Resultado del cálculo espesor mínimo para un diámetro nominal de 2 pulgadas\**

CÁLCULO ESPESOR DE TUBERÍAS SOMETIDAS A PRESIÓN INTERNA ASME B311 Ø 2"		
VARIABLE	SIMBOLOGÍA	VALOR
Presión (MPa)	P	25
Presión diseño (MPa)	P <sub>d</sub>	28,125
Diámetro externo (mm)	D <sub>0</sub>	60,32
Eficiencia de junta	E	1
Tensión máxima permisible (MPa)	S	90,9
Corrosión (mm)	c	1,5
Coeficiente de distribución (t<D/6)	y	0,7
Tolerancia de fabricación	M	1,125
Espesor mínimo de tubería	t <sub>m</sub>	10,32
Coeficiente de distribución (t>D/6)	y'	0,41
Espesor mínimo de tubería (t>D/6)	t <sub>m</sub> '	10,99

*\*El hecho de que existan dos valores de espesor mínimo se debe a la metodología de cálculo del código ASME B31.3 Process Piping, (véase el Anexo 4)*

Según el catálogo consultado de la empresa "TUBINOX", ésta oferta tuberías hechas de Inconel 625 de 11,07 mm, catalogada como 2" XXS [15]. En la siguiente Tabla 10 se muestra el cálculo de la longitud del reactor necesaria en función del caudal de operación seleccionado y el valor del número de Reynolds para estas combinaciones de diámetro y caudal:

*Tabla 10: Cálculo del caudal de operación óptimo para una tubería 2" XXS*

<b>Selección de diámetro y longitud del reactor d=38,18 mm <math>\tau</math>=11,27 min</b>					
Q (L/s)	Q (L/h)	V lineal reactor (m/s)	Volumen reactor (L)	Longitud (m)	Re (650°C 25MPa)
0,034	122	0,473	366,30	319,95	32134
0,035	126	0,487	377,08	329,36	33079
0,036	130	0,501	387,85	338,77	34024
0,037	133	0,515	398,62	348,18	34969
0,038	137	0,529	409,40	357,59	35914
0,039	140	0,543	420,17	367,00	36860
0,040	144	0,557	430,94	376,41	37805
0,041	148	0,571	441,72	385,82	38750
0,042	151	0,585	452,49	395,23	39695
0,043	155	0,598	463,27	404,64	40640
0,044	158	0,612	474,04	414,05	41585
0,045	162	0,626	484,81	423,46	42530
0,046	166	0,640	495,59	432,87	43475
0,047	169	0,654	506,36	442,28	44420
0,048	173	0,668	517,13	451,69	45366
0,049	176	0,682	527,91	461,10	46311
0,050	180	0,696	538,68	470,51	47256
0,051	184	0,710	549,45	479,92	48201
0,052	187	0,724	560,23	489,33	49146

Como se observa en la Tabla 10, el valor de Re es lo suficientemente grande como para que el comportamiento del reactor diseñado se aproxime en gran medida a un RFP. En la Tabla 10 se muestra que el caudal de operación para obtener un reactor de 400 metros se encuentra entre 151 y 155 L/h. Si el reactor fuese de 500 metros podría aumentarse dicho caudal unos 40 L/h, lo cual podría justificar el aumento de longitud del mismo, pero, como se indicó anteriormente, se trata de una instalación a escala de planta piloto y el principal objetivo es el estudio de la viabilidad de la operación de la propia planta. Si el objetivo, por el contrario, fuese tratar la mayor corriente posible para maximizar los beneficios, la instalación y reactor serían mucho más grandes (o se trabajaría a una temperatura superior), pero para una planta piloto un reactor de 400 metros ya es lo suficientemente grande.

Por otro lado, la velocidad lineal en el interior del reactor no alcanza los 2 m/s que se suele imponer para que se dé el arrastre de sólidos, pero, como la corriente a tratar no contiene ni genera ningún material sólido, esto no supone problema alguno. Asimismo, el reactor contará con una disposición espacial ligeramente descendente para evitar la deposición de sólidos inesperados. En la Tabla 11 se muestran los resultados finales del reactor una vez que queda fijado el diámetro de las conducciones del mismo:

*Tabla 11: Resultado del cálculo caudal de operación y Re para diámetro nominal de 2" XXS*

CÁLCULO CAUDAL DE OPERACIÓN PARA REACTOR DE Ø 2"		
VARIABLE	SIMBOLOGÍA	VALOR
Diámetro externo (mm)	D	60,32
Espesor de tubería comercial (mm)	t	11,07
Diámetro interno (mm)	d	38,18
Caudal volumétrico (L/h)	Q	153,03
Volumen reactor (L)	V	457,95
Longitud del reactor (m)	L	400
Re (650°C 25MPa)	Re	40174
L/D	-	6631,30

De esta forma, el caudal de alimentación será de 153 L/h para que en el reactor de 400 metros se alcance el grado de conversión buscado.

### **9.6.3 SELECCIÓN DEL AISLANTE TÉRMICO**

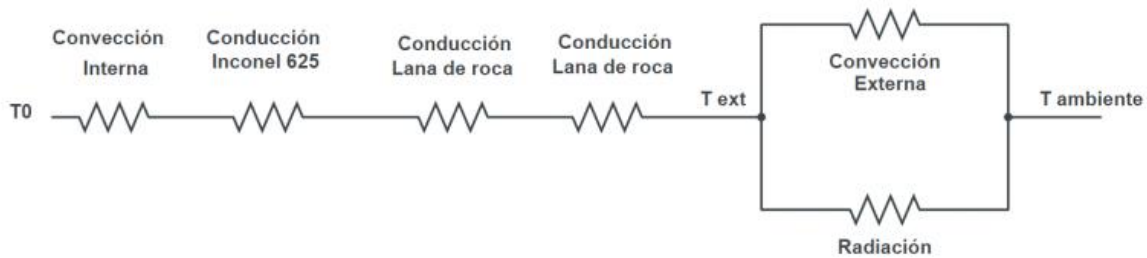
Como se indicó en las especificaciones de diseño, el reactor que se pretende diseñar trabajará de forma adiabática, es decir, sin intercambio de calor con el exterior. En la práctica esto es un objetivo imposible de alcanzar, pero sí puede disminuirse dicha transferencia hasta valores muy pequeños mediante el uso del aislante térmico adecuado.

Se ha realizado una búsqueda de los materiales aislantes más utilizados industrialmente que sean capaces de soportar altas temperaturas de operación, comparándolos entre sí para obtener la mejor solución para el reactor del presente TFG (véase Anexo 4) [16,17]. Tras el estudio de los distintos materiales y espesores comerciales de los mismos, se ha decidido que la primera capa sea una coquilla de lana mineral de 60 mm de espesor, que se ajusta a la perfección a las dimensiones de la conducción, de forma que se reduce la posibilidad de que se formen puentes térmicos. Para la segunda capa de aislante se estudió el uso de lana de vidrio, pero la unión entre ambas capas de aislante se encontraría a una temperatura superior a la máxima de servicio de este material (400 °C) por lo que su uso quedaba impedido. Finalmente, el segundo aislante será una manta de lana de roca con el objetivo de que la temperatura superficial del aislante sea como máximo de 60 °C para cumplir con la norma UNE-EN ISO 12241:2010, sobre aislamiento térmico en instalaciones industriales. Por último, se colocará una chapa de aluminio brillante de poco espesor para proteger al aislante del contacto y la humedad.

La transferencia de calor ocurre siempre del foco caliente al foco frío, es decir, del interior de la tubería hasta el ambiente externo de la misma. Siguiendo el orden de transmisión, primero se produciría la convección interna hasta la pared de la tubería de Inconel 625, posteriormente tendrá lugar una transferencia por conducción a través de las paredes de la propia tubería, luego se encuentra otro sólido por lo que se vuelve a hablar de conducción a lo largo del primer aislante y, más adelante,

del segundo. Por último, se presenta un fenómeno de transferencia de calor por dos vías, convección natural con el aire exterior y radiación. Según el Real Decreto 178/2021, las temperaturas operativas de equipos de refrigeración y calefacción deben estar entre 21 y 25 °C por lo que se realizará el cálculo del aislante necesario para una temperatura ambiente de 21 °C.

En la Figura 18 se muestra la analogía del sistema térmico en estudio con un circuito eléctrico:



*Figura 18: Esquema del circuito eléctrico equivalente*

Siguiendo las leyes de los circuitos eléctricos se obtiene la expresión para la resistencia total:

$$R_{\text{Total}} = \frac{1}{2\pi r_{r \text{ int}} h_{cv\_int}} + \frac{\ln(r_{r \text{ ext}}/r_{r \text{ int}})}{2\pi k_{\text{Inconel}}} + \frac{\ln(r_{A1}/r_{r \text{ ext}})}{2\pi k_{A1}} + \frac{\ln(r_{A2}/r_{A1})}{2\pi k_{A2}} + \frac{1}{2\pi r_{A2}(h_{cv\_ext} + h_{rad})} \quad (6)$$

El flujo de calor se calcula mediante la ley de transferencia de calor (ecuación 7):

$$Q = \frac{\text{Fuerza impulsora}}{\text{Resistencia total}} = \frac{\Delta T}{R_{\text{total}}} \quad (7)$$

Sustituyendo la ecuación 6 en la 7 se obtiene la expresión global para la transferencia de calor en el sistema en estudio:

$$Q = \frac{T_0 - T_\infty}{\frac{1}{2\pi r_{r \text{ int}} h_{cv\_int}} + \frac{\ln(r_{r \text{ ext}}/r_{r \text{ int}})}{2\pi k_{\text{Inconel}}} + \frac{\ln(r_{A1}/r_{r \text{ ext}})}{2\pi k_{A1}} + \frac{\ln(r_{A2}/r_{A1})}{2\pi k_{A2}} + \frac{1}{2\pi r_{A2}(h_{cv\_ext} + h_{rad})}} \quad (8)$$

La forma de resolver esta ecuación por las características del sistema pasa por suponer un valor para el radio final con el aislante y calculando el calor cedido al entorno mediante radiación y convección. A partir del valor del flujo de calor en el sistema se podrán calcular las temperaturas de las distintas capas y el espesor del segundo aislante para esa transferencia de calor. La solución será correcta cuando el radio de aislante calculado y el supuesto coincidan. En el Anexo 4 se desarrolla el cálculo de ciertos parámetros de importancia para el cálculo como son el coeficiente de convección interno, el externo y los coeficientes de conducción de las distintas capas. Además, se explica la construcción de una hoja de cálculo en Excel para la resolución de la ecuación 8, así como todos los resultados intermedios. En la Tabla 12 se muestran los resultados para una temperatura superficial de 40 °C:

*Tabla 12: Resultados del cálculo del espesor de aislante para 40 °C de Ts*

Resultados del cálculo del espesor de aislante		
Tª Fluido	650	°C
Tª Pared reactor int	645,85	°C
Tª Pared reactor ext	645,27	°C
Tª Aislante 1	453,96	°C
Tª Aislante 2	40	°C
Espesor Aislante 1	0,06	m
Espesor Aislante 2	0,235	m
Radio ext	0,326	m
Flujo de calor	153,011	W/m

Como se observa en la Tabla 12, la temperatura entre ambos aislantes es superior a la temperatura máxima de servicio de la lana de vidrio, la cual era de 400 °C por lo que este material no es adecuado para el proceso. Por otro lado, se necesitaría un espesor de 238 mm para la segunda capa de aislante para que la temperatura superficial sea de 40 °C. En la Tabla 13 se muestra el resultado de usar distintos espesores de Wired Mat 4.2 (manta de lana mineral) comercializados por “ISOVER”:

*Tabla 13: Resultados de las temperaturas del reactor para distintos espesores de Wired Mat 4.2*

Estudio de distintos espesores de TECH Wired Mat 4.2					
Espesor (mm)	Radio ext (m)	Flujo de calor (W/m)	Tª Aislante 1 (°C)	Tª Superficial (°C)	Diámetro total (m)
70	0,230	181,94	422,17	48,99	0,460
80	0,250	174,44	431,57	46,49	0,500
100	0,290	162,45	446,58	42,64	0,580
120	0,330	153,76	457,47	39,86	0,660

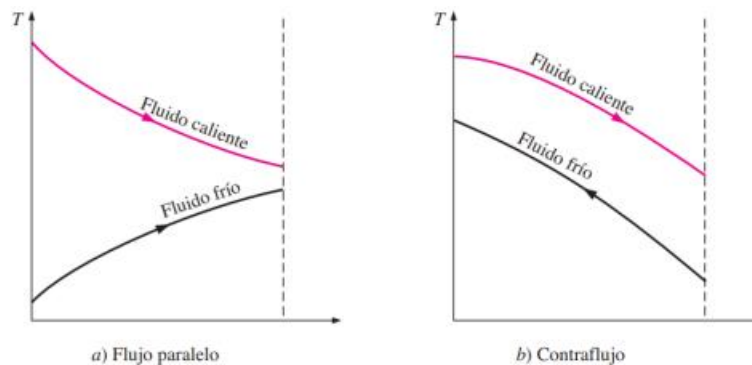
El objetivo inicial era calcular el espesor de aislante necesario para que la temperatura superficial de dicho aislante fuese de 40 °C, a pesar de que la legislación habla de una temperatura máxima de 60 °C. Esta decisión se tomó con el objetivo de minimizar las pérdidas energéticas y poder suponer que el reactor trabaja de forma adiabática. Sin embargo, en el diseño del reactor, ya se contabilizaron pequeñas pérdidas energéticas por no ser el aislamiento del mismo perfecto, de forma que está justificado seleccionar el aislante de 70 mm de espesor. Con esta opción, la temperatura superficial sigue estando por debajo de los 50 °C por lo que las pérdidas energéticas seguirán siendo bastante bajas y se reducirá bastante el coste de aislar térmicamente el reactor al utilizar un espesor de casi la mitad (20 cm menos de la segunda capa).

Por tanto, el reactor se aislará con una primera capa de lana mineral en forma de “section pipe” de 60 mm que se ajustará a la perfección al reactor, disminuyendo la probabilidad de formación de puentes térmicos, seguida de dos capas de 70 mm de lana mineral y, por último, una capa de aluminio brillante fina para evitar el deterioro del aislante. El diámetro total de la tubería más el aislante será, como se muestra en la Tabla 13, de 0,46 m.

## 9.7 INTERCAMBIADOR DE CALOR

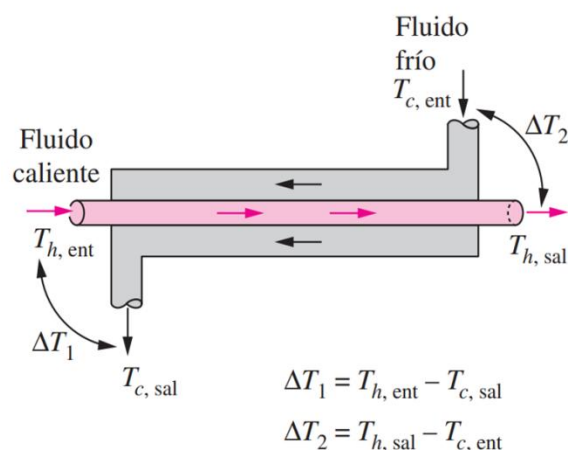
### 9.7.1 DISEÑO DEL IC

Un intercambiador de calor es un equipo que permite la transferencia de calor entre dos fluidos sin que se produzca la mezcla de los mismos. Existen multitud de intercambiadores de calor y disposiciones de los mismos, pero, por las condiciones de presión a las que se someterá este, el más adecuado es el de tubos concéntricos o doble tubo. En un intercambiador de tubos concéntricos, uno de los fluidos pasa por el tubo más pequeño, en tanto que el otro lo hace por el espacio anular entre los dos tubos. No es el tipo de intercambiador que ofrece la mayor área de transferencia, pero permite trabajar con fluidos a presiones de cientos de bares. El objetivo del presente IC es aprovechar el calor del efluente del reactor para precalentar la alimentación. Para maximizar el rendimiento del IC, la configuración de flujo será en contracorriente para que la diferencia de temperatura media logarítmica (LMTD) sea mucho más uniforme a lo largo del IC, algo que se evidencia en la Figura 19:



*Figura 19: Comparación del resultado de un intercambiador de tubos concéntricos según la disposición de flujo, Transferencia de calor y masa, Yunus A. Cengel [18]*

Además, otra ventaja para el caso de un intercambiador con una disposición en contracorriente, la temperatura de salida del fluido frío puede ser mayor que la del fluido caliente. La disposición de los fluidos en el interior de un IC de tubos concéntricos en contracorriente se representa en la Figura 20:



*Figura 20: Disposición de flujo de un IC de tubos concéntricos en contracorriente [18]*



Resulta evidente que el fluido caliente irá por el tubo interior, pero no quedan definidas las dimensiones de este ni del tubo exterior por el que circula el fluido frío. Es importante fijar el tamaño de los tubos que conforman el IC, puesto que todos los parámetros de importancia para la transferencia de calor, como los coeficientes de convección, dependen en gran medida del diámetro de las conducciones. Además, no todas las combinaciones de diámetros son posibles, ya que ambos tubos tendrán un gran espesor para soportar la presión de diseño.

Idealmente, el tubo interno no necesitaría contar con un gran espesor, puesto que la presión interna es igual a la externa y no actuaría fuerza alguna sobre la pared del tubo interior más allá del rozamiento de los fluidos. Sin embargo, en el funcionamiento real la presión en el interior será ligeramente menor debido a la pérdida de carga y, en distintas situaciones como son el arranque y la parada de la planta, sí existirán grandes variaciones de la presión interna y externa del tubo. Por tanto, para asegurar la integridad del tubo interior antes estas situaciones y posibles fallos en la operación, se impondrá un espesor capaz de soportar la presión de diseño (un 12,5% mayor a la de operación) tanto interna como externa.

Atendiendo a los diámetros y espesores comercializados por la empresa “TUBINOX” en Inconel 625, se ha construido la Tabla 14 con las posibles combinaciones entre diámetros para la construcción del intercambiador de calor, siendo los cuadros verdes las combinaciones posibles:

*Tabla 14: Posibles combinaciones entre conducciones exterior e interior*

Interior \ Exterior	1" XXS $d_e = 33,4 \text{ mm}$	3/4" XXS $d_e = 26,7 \text{ mm}$	1/2" XXS $d_e = 21,3 \text{ mm}$
2" XXS $D_0 = 38,18 \text{ mm}$	$d_i = 15,22 \text{ mm}$ $D_H = 4,78 \text{ mm}$	$d_i = 11,06 \text{ mm}$ $D_H = 11,48 \text{ mm}$	$d_i = 6,36 \text{ mm}$ $D_H = 16,88 \text{ mm}$
1 1/2" XXS $D_0 = 27,98 \text{ mm}$	$d_e > D_0$	$d_i = 11,06 \text{ mm}$ $D_H = 1,28 \text{ mm}$	$d_i = 6,36 \text{ mm}$ $D_H = 6,68 \text{ mm}$
1 1/4" XXS $D_0 = 22,8 \text{ mm}$	$d_e > D_0$	$d_e > D_0$	$d_i = 6,36 \text{ mm}$ $D_H = 1,5 \text{ mm}$

Los cuadros en rojo en la anterior Tabla 14 hacen referencia que el diámetro externo del tubo interior es mayor que el diámetro interno del tubo exterior, por lo que el intercambiador no podría montarse. El diámetro hidráulico,  $D_H$ , es la longitud característica del tubo externo que, a efectos prácticos, se trata de una corona circular. El objetivo es comparar los resultados que ofrecen las diferentes combinaciones catalogadas como válidas en la Tabla 14 para la construcción del IC.

La ecuación de diseño para un intercambiador de calor es la siguiente:

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{ml} \quad (9)$$

Siendo:

$$\Delta T_{ml} = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln(\Delta T_1 / \Delta T_2)} \quad (10)$$

Donde  $\Delta T_1$  y  $\Delta T_2$  hacen referencia a la diferencia de temperatura entre el fluido caliente y frío en cada extremo del intercambiador de calor, como se muestra en la anterior Figura 19.

Suponiendo que la superficie exterior del intercambiador de calor está perfectamente aislada, hasta el punto de que no se tiene pérdida de calor hacia el medio circundante y cualquier transferencia de calor solo ocurre entre los dos fluidos, la primera ley de la termodinámica requiere que la velocidad de la transferencia de calor desde el fluido caliente sea igual a la transferencia de calor hacia el frío, es decir:

$$\dot{Q} = m_c \cdot c_{pc} \cdot (T_{c, ent} - T_{c, sal}) \quad (11)$$

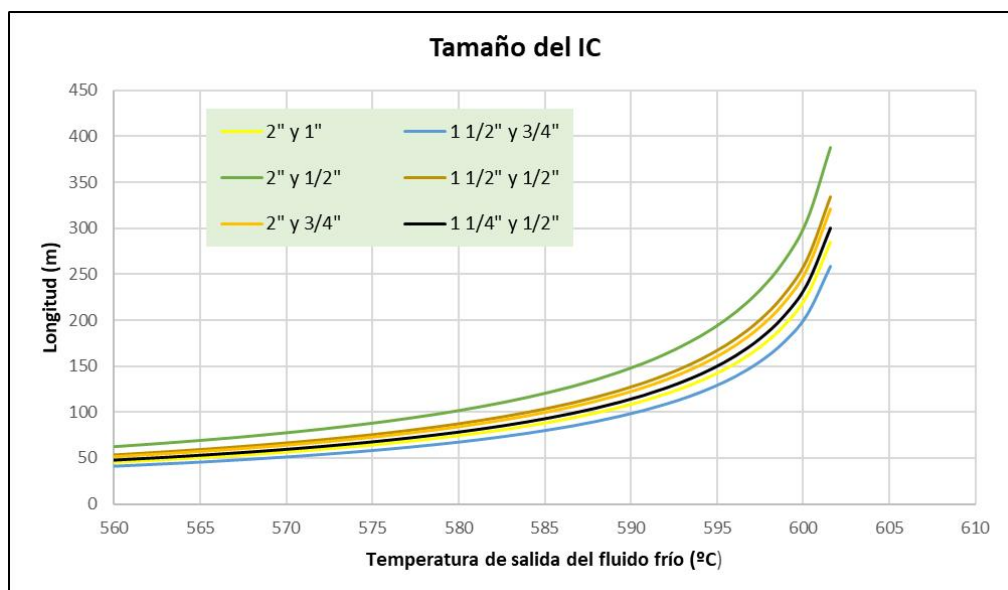
$$\dot{Q} = m_f \cdot c_{pf} \cdot (T_{f, sal} - T_{f, ent}) \quad (12)$$

De forma simplificada se presenta un sistema de 3 ecuaciones con 4 incógnitas, puesto que no se conocen las temperaturas de salida de ambas corrientes, el coeficiente global de transmisión de calor y el área de intercambio, que es el objetivo del cálculo. Por tanto, existe un grado de libertad y el procedimiento de cálculo más intuitivo sería el siguiente:

1. Suponer una temperatura de salida para el fluido caliente.
2. Calcular el calor que debe ceder la corriente caliente para abandonar el intercambiador a esa temperatura (ecuación 11).
3. Calcular la temperatura de salida del fluido frío a partir del calor ganado por la corriente fría, que es igual al cedido por la caliente (ecuación 12).
4. Calcular el incremento de temperatura media logarítmica (ecuación 10).
5. Determinar los coeficientes de convección de la cara interna y externa de la pared de intercambio.
6. Determinar la conductividad térmica del Inconel 625 en las condiciones de operación.
7. Calcular la resistencia térmica total.
8. Determinar el coeficiente global de transferencia de calor.
9. Calcular el área de intercambio necesario para que se produzca la transferencia de calor supuesta.
10. Calcular la longitud del intercambiador de calor diseñado.

En el Anexo 5 se desarrolla la construcción de un simulador del intercambiador de calor en una hoja de cálculo en Excel basado en la secuencia de cálculo presentada arriba para cada posible temperatura de salida del fluido caliente y se ejemplifica el cálculo para el caso de que la corriente caliente abandone el intercambiador a 100 °C.

En la Figura 21 se presentan los resultados de las distintas combinaciones de diámetros expuestas en la Tabla 14, a partir de la cual, es posible observar que la combinación de 1 1/2" y 3/4" es la que necesita de una menor longitud para el mismo intercambio, es decir, obtiene mejores resultados:



*Figura 21: Comparativa entre el tamaño del IC para las posibles combinaciones de diámetro entre las conducciones*

Una vez elegida la combinación de diámetros que ofrece mejores resultados, se debe comprobar que el tubo interior sea capaz de soportar una presión externa de 25 MPa, ya que, en diversas situaciones como puede ser el propio inicio de la operación, se encontrará con esta presión por su cara externa y la ambiental por la interna. Para el estudio del posible pandeo de la tubería interna se atenderá al código ASME BPV, Sección VIII, División 1, 2 y 3 (2010). A partir de dicha norma se calcula la presión externa que es capaz de soportar una tubería con las dimensiones estudiadas y, en caso de que no sea capaz de soportar 28,125 MPa (un 12,5% más que la presión de operación), será necesario seleccionar otra combinación para el IC. Tras realizar los cálculos necesarios (véase Anexo 5) se determina que la tubería interna es capaz de soportar una presión externa de 69,13 MPa, por lo que la solución es válida.

En cuanto a la selección de la longitud óptima del intercambiador, la corriente fría no es la única de interés operacional, puesto que, en función de la temperatura a la que la corriente caliente abandone el equipo, podría tener algún uso en la propia planta como la posibilidad de generación de vapor de baja presión o agua caliente sanitaria (ACS). La primera opción no es posible porque se estaría desaprovechando la posibilidad de calentar mucho más la corriente fría, puesto que la caliente debería abandonar el IC, como mínimo, a unos 140 °C para poder generar vapor a partir de agua. El caso de una corriente de ACS es más interesante y viable, pero debe atenderse al Real Decreto 865/2003, del 4 de julio, por el que se establecen los criterios higiénico-sanitarios para la prevención y control de la legionelosis. En él se menciona que las instalaciones para la generación de ACS con acumulador y

circuito de retorno son mucho más eficientes, pero están clasificadas como “instalaciones con mayor probabilidad de proliferación y dispersión de Legionella”.

Las instalaciones con acumulador presentan ventajas como permitir mantener la temperatura del agua circulante más caliente al volver al depósito en cada ciclo, mejorar el confort de los usuarios porque disponen más rápidamente del agua y suponer un ahorro energético y de consumo de agua importante, ya que evita desechar el agua que había sido previamente calentada, pero según el RD mencionado, el agua en los acumuladores no puede descender de los 60 °C. Para lograr esto, la corriente caliente debe estar, al menos, a unos 80 °C. En la siguiente Figura 22 se muestra el tamaño del IC en el régimen óptimo, así como el tamaño seleccionado:

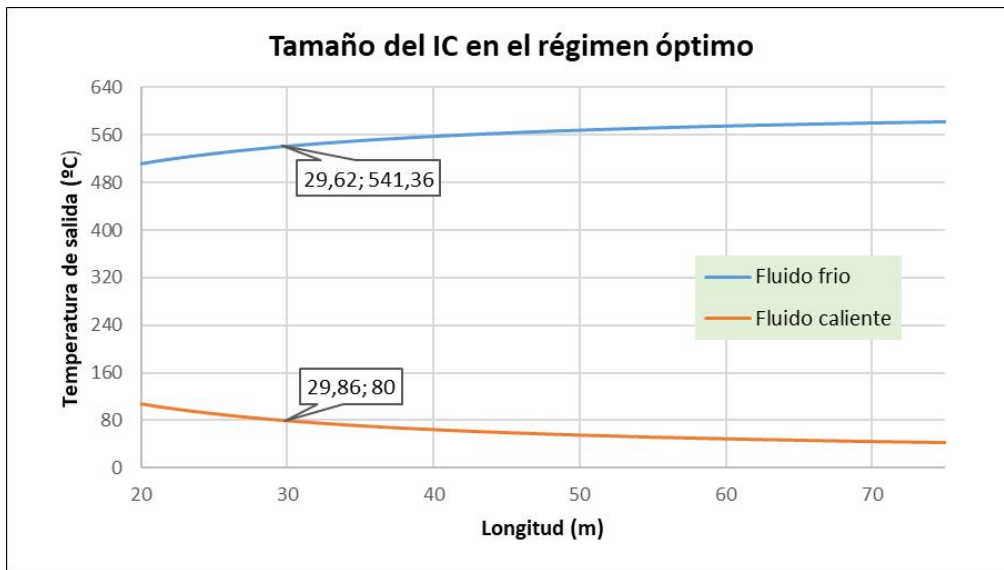


Figura 22: Comparativa entre la  $T^a$  de salida de ambas corrientes del IC en función de su tamaño

Con el objetivo de que el IC cuente con un tamaño que sea múltiplo de las longitudes de tubos comerciales, el tamaño del mismo será de 30 metros. A continuación, se interpolan la temperatura de salida de ambos fluidos a partir de los puntos de la curva anterior y posterior a dicha longitud.

Fluido frío:

$$\frac{541,36 - 542,6}{29,62 - 30,2} = \frac{541,34 - T_{frío}}{29,62 - 30}$$
$$T_{frío} = 542,17 \text{ °C}$$

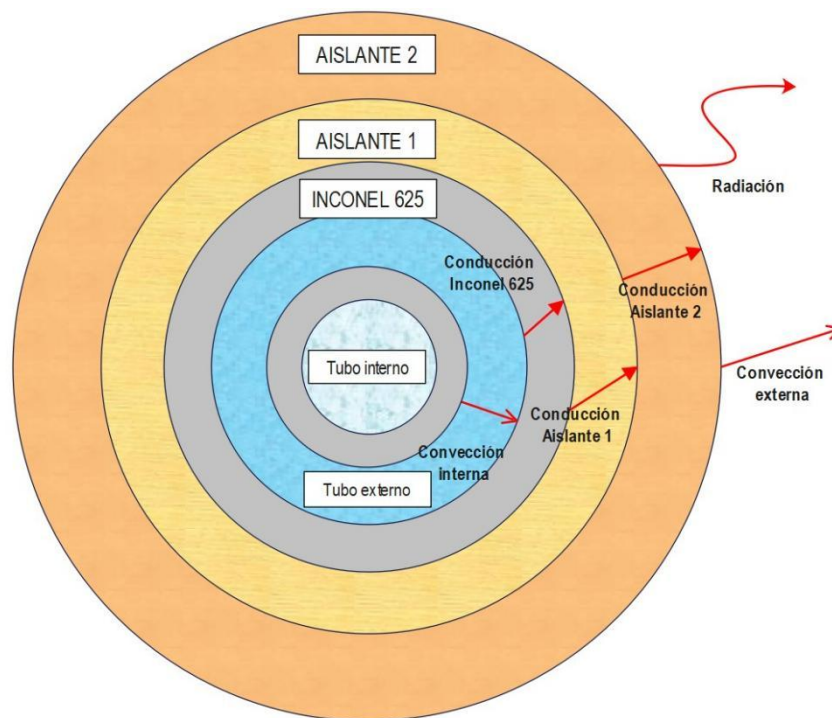
Fluido caliente:

$$\frac{80 - 79}{29,86 - 30,375} = \frac{80 - T_{caliente}}{29,86 - 30}$$
$$T_{caliente} = 79,73 \text{ °C}$$

## 9.7.2 SELECCIÓN DEL AISLANTE

El aislante del IC debe cumplir exactamente los mismos requisitos que el del reactor, temperatura superficial no muy superior a 40 °C y, bajo ningún concepto, superior a 60 °C. Se realizará el cálculo del aislante necesario atendiendo a la temperatura más alta alcanzada por la corriente fría, es decir, 542,2 °C. Por las mismas razones que con el reactor, la primera capa de aislante será una coquilla de lana mineral con un diámetro interno correspondiente a 1 1/2" y un espesor de 60 mm. Además, se estudiará el uso de la misma manta de lana de roca usada en el aislamiento del reactor (70 mm) para la segunda capa de aislante, ya que esto facilitaría el almacenamiento y compra del aislante al tener que comprar un solo tipo.

En la Figura 23 se muestra una representación de la transferencia de calor desde la corriente fría hasta el ambiente:



*Figura 23: Representación de la transferencia de calor en el IC*

El esquema eléctrico equivalente y la metodología de cálculo es idéntica a la del aislante del reactor. Tras realizar dicho cálculo (véase Anexo 5 para el desarrollo del mismo) se obtienen los resultados mostrados en la siguiente Tabla 15 para el uso de dos capas de la manta de lana mineral de 70 mm:

*Tabla 15: Resumen de resultados de las temperaturas y espesores de aislante del IC*

Resultados finales		
Tª Fluido	542,2	°C
Tª Pared reactor int	542,19	°C
Tª Pared reactor ext	541,62	°C
Tª Aislante 1	331,94	°C
Tª Aislante 2	40,95	°C
Espesor Aislante 1	0,06	m
Espesor Aislante 2	0,140	m
Radio ext	0,224	m
Flujo de calor	114,933	W/m

La temperatura superficial del segundo aislante en estas condiciones sería de 40,95 °C por lo que la manta de 70 mm de lana mineral (2 vueltas) es una muy buena solución. Además, está el beneficio añadido de que tanto el reactor como el intercambiador, utilizarán el mismo aislante para la segunda capa.

### 9.7.3 CALENTADOR

A pesar de que el diseño del calentador o la caldera que logrará que la corriente de alimentación alcance la temperatura de reacción no entra en las competencias del presente TFG, se calculará el calor que debe aportar la misma para poder considerar su gasto en el presupuesto.

El cálculo se ha realizado a partir de la capacitancia térmica de la corriente de alimentación a cada temperatura:

$$C = C_p \cdot W_m \quad (13)$$

Es decir, se ha resuelto gráficamente el área bajo la curva de la función del  $C_p$  frente a la temperatura. Dicho cálculo se ha realizado en una hoja de cálculo en Excel y se detalla en el Anexo 5. Finalmente, se obtiene que se debe suministrar 14,013 kW a la corriente de alimentación para que, saliendo del intercambiador de calor a 540 °C, ésta entre al reactor a la temperatura de operación, es decir, 650 °C. Como ya se ha mencionado, este calor se aportará a la corriente de alimentación previa entrada de la misma en el reactor mediante una caldera o una resistencia.

### 9.8 DISEÑO DE EQUIPOS AUXILIARES

En el Anexo 6 se ha realizado una breve descripción del resto de equipos, tanto principales como auxiliares y de control, que, junto con el reactor y el intercambiador de calor diseñados en detalle, componen la planta de GASC de fenol del presente proyecto. Además, se han seleccionado varios de estos equipos de catálogos, destacando la importancia de los tanques de almacenamiento y la bomba que aporta el caudal y presión necesaria a la corriente.

## 9.8.1 TANQUES DE ALMACENAMIENTO

La alimentación ya se encuentra a la concentración de fenol requerida en el tanque de alimentación. Como puede observarse en el diagrama de flujo del proceso, se ha diseñado la planta con dos tanques de almacenamiento, es decir, el tanque se encuentra por duplicado. Esta decisión se tomó, principalmente, por dos motivos:

- Debido a que la planta es a escala piloto, no se pretende tener equipos demasiado grandes, por lo que se va a rellenar un tanque mientras se usa el otro.
- Por seguridad siempre está bien tener los equipos de menor coste por duplicado para evitar cualquier fallo en el sistema.

Finalmente, se ha seleccionado un depósito vertical con patas de la empresa “Hidroserver” que cuenta con una capacidad de 5000 litros y con la descarga del mismo casi a nivel del suelo, el cual permite operar más de un día con un solo tanque, lo que resulta muy beneficioso en caso de fallo en una de las líneas de alimentación.

## 9.8.2 BOMBAS

Para el dimensionamiento de la bomba se empleará la ecuación de Bernoulli modificada:

$$\frac{P_2 - P_1}{\rho g} + (Z_2 - Z_1) + \frac{V_2^2 - V_1^2}{2g} + h_f = h_{A, NETA} \quad (14)$$

En ningún punto del proceso se alcanzan velocidades lo suficientemente altas como para que su contribución a la carga total a aportar por la bomba sea destacable [19]. La pérdida de carga en una conducción por el rozamiento del fluido se calcula con la siguiente expresión:

$$h_f = f \cdot \left(\frac{L}{D}\right) \cdot \left(\frac{V^2}{2 \cdot g}\right) \quad (15)$$

Siendo “f” el factor de fricción que se obtendrá mediante la ecuación de Haaland (ecuación 16):

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -1,8 \cdot \log \left[ \left(\frac{\varepsilon/D}{3,7}\right)^{1,11} + \frac{6,9}{Re} \right] \quad (16)$$

En el Anexo 6 se desarrolla el cálculo para obtener la pérdida de carga que tiene lugar en el interior del reactor, la cual es de 4,29 m (0,42 bar), así como la pérdida de carga en las demás conducciones y equipos. La pérdida de carga por rozamiento total en el sistema es de 11,01 metros de columna de agua (1,08 bar) por lo que la alimentación entrará al reactor a 250,5 bar. La carga que debe aportar la bomba para que la alimentación entre al reactor a esa presión se calcula a partir de la ecuación de Bernoulli modificada, tomando el término cinético como despreciable:

$$h_{A, NETA} = \frac{(250,5 - 1,01) \cdot 10^5}{997 \cdot 9,81} + (4 - 0) + (3,144 + 4,29) = 2564,86 \text{ m}$$

Suponiendo un rendimiento del 80%:

$$\text{Potencia} = \frac{2559,7 \cdot (997 \cdot 0,0000425) \cdot 9,81}{0,8} = 1332 \text{ W} \rightarrow 1,33 \text{ kW}$$

En el Anexo 6 se desarrolla este cálculo y se dan más detalles de la bomba seleccionada, el modelo XLT1530I que puede impulsar un caudal máximo 900 L/h y una presión máxima de 300 bar, por lo que con total seguridad será capaz de impulsar un caudal de 153 L/h a la presión necesaria. Tiene una potencia máxima de 10,2 kW, por lo que también cumple este requisito con creces.

## 10. PLANIFICACIÓN

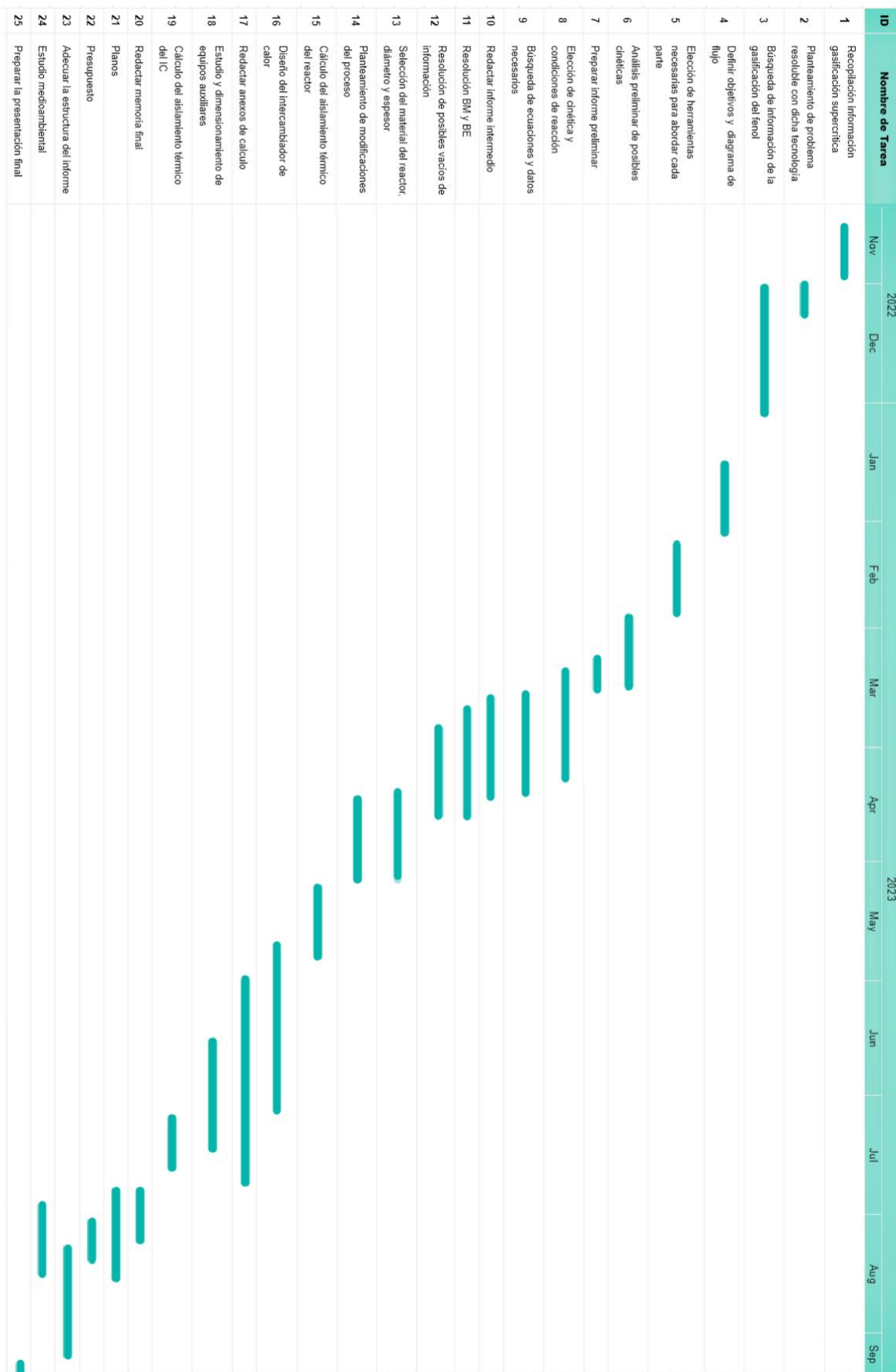
Para la elaboración del presente TFG se ha realizado el seguimiento de una planificación elaborada durante el desarrollo del informe inicial. Dicha programación se ha visto modificada, por lo que se elaboró una nueva con los cambios y se mostrará a continuación. En la Tabla 16 se recogen las tareas realizadas y su duración y en la Figura 24 se muestran las distintas interacciones y etapas en paralelo durante el trabajo mediante un Diagrama de Gantt.

*Tabla 16: Planificación de las tareas*

ID	Nombre de Tarea	Fecha de inicio	Fecha de finalización	Duración	Recurso
1	Recopilación información gasificación supercrítica	2022-11-15	2022-11-29	15.0 d.	Scopus
2	Planteamiento de problema resoluble con dicha tecnología	2022-11-29	2022-12-09	10.0 d.	
3	Búsqueda de información de la gasificación del fenol	2022-11-30	2023-01-04	35.0 d.	Scopus-Google Académico
4	Definir objetivos y diagrama de flujo	2023-01-15	2023-02-04	20.0 d.	Edraw
5	Elección de herramientas necesarias para abordar cada parte	2023-02-05	2023-02-24	20.0 d.	
6	Análisis preliminar de posibles cinéticas	2023-02-24	2023-03-16	20.0 d.	Excel
7	Preparar informe preliminar	2023-03-08	2023-03-16	10.0 d.	PowerPoint
8	Elección de cinética y condiciones de reacción	2023-03-10	2023-04-09	30.0 d.	Scopus-Excel
9	Búsqueda de ecuaciones y datos necesarios	2023-03-17	2023-04-13	28.0 d.	Scopus-Libros-Apunte
10	Redactar informe intermedio	2023-03-17	2023-04-14	28.0 d.	Word
11	Resolución BM y BE	2023-03-20	2023-04-19	30.0 d.	Excel-NIST
12	Resolución de posibles vacíos de información	2023-03-25	2023-04-19	25.0 d.	NIST-Aspen-Excel
13	Selección del material del reactor, diámetro y espesor	2023-04-11	2023-05-05	25.0 d.	Catálogos-Excel
14	Planteamiento de modificaciones del proceso	2023-04-13	2023-05-05	23.0 d.	Google-Excel
15	Cálculo del aislamiento térmico del reactor	2023-05-06	2023-05-25	20.0 d.	Excel
16	Diseño del intercambiador de calor	2023-05-21	2023-07-04	45.0 d.	Excel
17	Redactar anexos de calculo	2023-05-30	2023-07-23	55.0 d.	Word
18	Estudio y dimensionamiento de equipos auxiliares	2023-06-15	2023-07-14	30.0 d.	Excel-Catálogos
19	Cálculo del aislamiento térmico del IC	2023-07-05	2023-07-19	15.0 d.	Excel
20	Redactar memoria final	2023-07-24	2023-08-07	15.0 d.	Word
21	Planos	2023-07-24	2023-08-17	25.0 d.	Autocad
22	Presupuesto	2023-08-01	2023-08-12	12.0 d.	Catálogos
23	Adecuar la estructura del informe	2023-08-08	2023-09-06	30.0 d.	Word
24	Estudio medioambiental	2023-07-28	2023-08-16	20.0 d.	Google-Aloha
25	Preparar la presentación final	2023-09-08	2023-09-15	8.0 d.	PowerPoint



*Diseño de un reactor para la gasificación en agua supercrítica de subproductos del reciclado de fibras de carbono de la industria aeronáutica*



*Figura 24: Diagrama de Gantt del proceso*

# **DOCUMENTO 2:**

# **ANEXOS**

## **ÍNDICE ANEXOS**

1. CÁLCULO DE PROPIEDADES .....	3
1.1 PROPIEDADES DE LOS REACTIVOS .....	3
1.1.1 AGUA .....	3
1.1.2 FENOL .....	5
1.2 PROPIEDADES DE LOS PRODUCTOS .....	9
1.2.1 HIDRÓGENO .....	9
1.2.2 DIÓXIDO DE CARBONO .....	10
1.2.3 MONÓXIDO DE CARBONO .....	11
1.2.4 METANO .....	13
2. CINÉTICA DE REACCIÓN .....	15
2.1 SELECCIÓN DE LA CINÉTICA .....	15
2.2 PRODUCTOS DE REACCIÓN .....	18
3. CÁLCULOS REFERIDOS AL REACTOR .....	26
3.1 BALANCE DE MATERIA .....	26
3.2 BALANCE DE ENERGÍA .....	28
3.3 CONDICIONES DE REACCIÓN .....	29
3.3.1 CONCENTRACIÓN INICIAL .....	29
3.3.2 CAUDAL .....	31
3.3.3 PRESIÓN .....	33
3.3.4 ENTALPÍA DE REACCIÓN Y TEMPERATURA .....	34
3.4 RESULTADO DE LOS BALANCES .....	39
4. DISEÑO DEL REACTOR .....	47
4.1 SELECCIÓN DEL MATERIAL .....	47
4.2 SELECCIÓN DEL DIÁMETRO .....	50
4.3 CÁLCULO DEL ESPESOR .....	52
4.4 CÁLCULO DEL AISLANTE .....	59
5. INTERCAMBIADOR DE CALOR .....	79
5.1 DISEÑO DEL INTERCAMBIADOR DE CALOR .....	79
5.2 CÁLCULO DEL AISLANTE .....	96
5.3 CALOR A APORTAR POR EL CALENTADOR .....	104
6. DIMENSIONAMIENTO DE EQUIPOS AUXILIARES .....	107
6.1 BOMBA .....	107
6.2 TANQUES DE ALIMENTACIÓN .....	113
6.3 OTROS EQUIPOS AUXILIARES .....	114
7. BIBLIOGRAFÍA .....	118

## **1. CÁLCULO DE PROPIEDADES**

A lo largo del presente anexo, se presentarán las propiedades que varían en el transcurso de la operación para los distintos componentes, además de ecuaciones polinómicas que permitan estudiar la evolución de dichas propiedades de forma continua, con el fin de poder representar de forma fiel cada corriente. Se necesita conocer la evolución de ciertas propiedades de la corriente de alimentación, formada por los reactivos, así como del efluente del reactor, en las distintas condiciones del proceso.

### **1.1 PROPIEDADES DE LOS REACTIVOS**

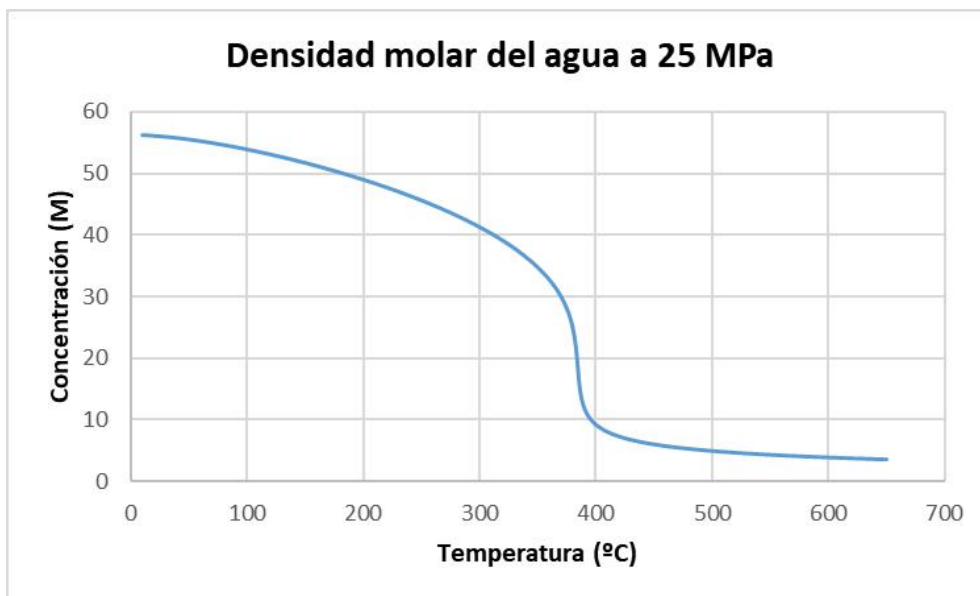
Antes de empezar con la resolución de los balances de materia y energía es necesario conocer cómo cambian las propiedades de los compuestos implicados, así como de la corriente global, durante el transcurso de la reacción química. Para ello, se atenderá a la base de datos de química del National Institute of Standards and Technology (NIST Chemistry WeebBook) para la presión de operación fijada [1].

No se ofrecen valores de las propiedades del fenol en rangos tan extremos, pero como se encuentra en una proporción muy inferior con respecto a la del agua, se considerará despreciable su efecto en la corriente de operación, es decir, se considerará la aproximación de que el medio de reacción comparte las mismas propiedades que el agua pura.

A continuación se representarán las propiedades termofísicas de densidad y calor específico para el agua a una presión constante de 25 MPa y para un rango de temperaturas comprendido entre 560-650 °C (el rango de temperatura debe abarcar de forma completa el estudio cinético del funcionamiento del reactor). Posteriormente, se ha realizado un ajuste polinómico para cada propiedad a fin de poder estimar su valor de forma sencilla en puntos concretos.

#### **1.1.1 AGUA**

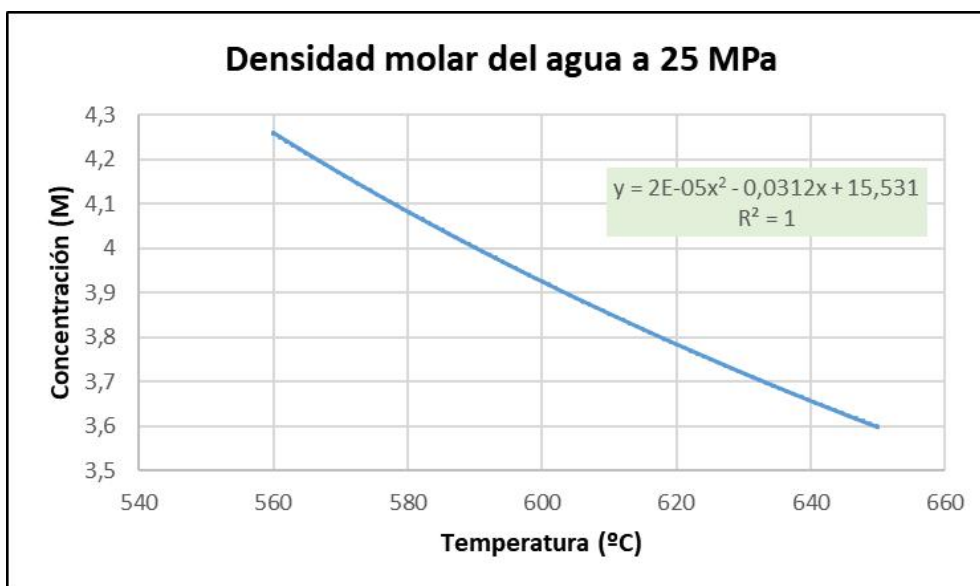
Como se mencionó anteriormente, el proceso de estudio de las propiedades se basa en la búsqueda de las mismas en las condiciones de operación y de una ecuación polinómica que se ajuste a la variación de las mismas para su estudio de forma continua. A continuación, se muestra la Figura A1, correspondiente a la variación de la densidad molar del agua con la temperatura:



*Figura A1: Variación de la concentración molar del agua*

Se necesitaría de un polinomio de un orden bastante alto para conseguir un ajuste decente para la variación de la densidad del agua debido al cambio de tendencia que experimenta la misma al superar el punto crítico (25 MPa, 373 °C). Por tanto, se estudiará la variación de esta propiedad en el rango de temperaturas de operación, es decir, entre 560 y 650 °C.

A continuación, se muestra la variación de la concentración del agua en el rango mencionado (Figura A2):



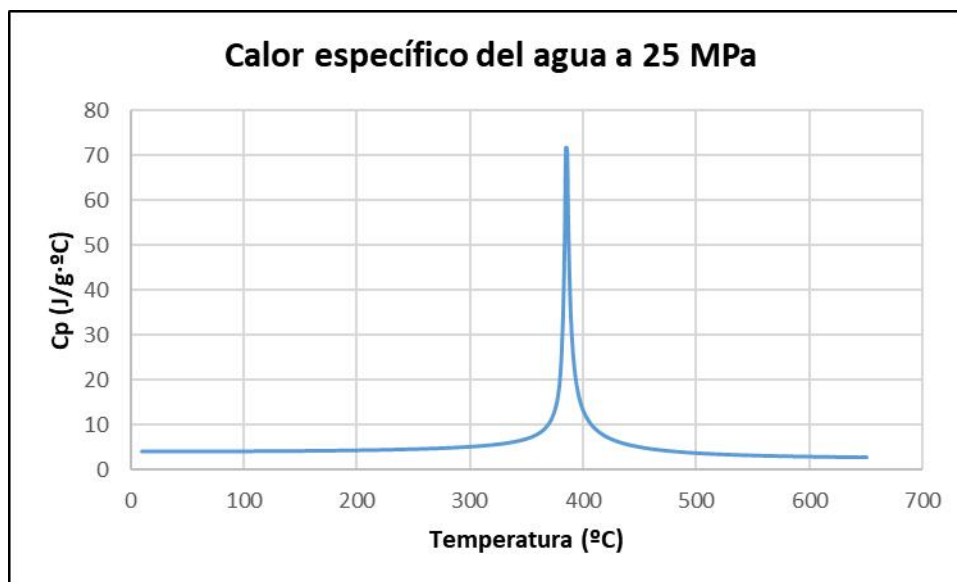
*Figura A2: Variación de la concentración molar del agua en las condiciones de reacción*

La ecuación del ajuste anterior se presenta de forma aproximada para no abarcar demasiado en la figura. A continuación, se muestra la misma de forma más rigurosa:

$$[H_2O] = 1,972 \cdot 10^{-5} \cdot T^2 - 0,031172 \cdot T + 15,53081$$

Siendo  $r^2=0,99998$

En la siguiente figura (Figura A3) se muestra la evolución del calor específico del agua a 25 MPa en función de la temperatura:



*Figura A3: Variación del calor específico del agua con la temperatura*

Se presenta el mismo problema que para la densidad molar, la linealidad o tendencia anterior, se pierde en las inmediaciones del punto crítico. De hecho, el valor del Cp del agua en dicho punto, parece infinito. Para obtener una ecuación que permita estimar esta propiedad de forma continua en cuanto a la temperatura, debe estudiarse en un rango en el que no exista una singularidad. Para ello, se ha obtenido la siguiente expresión para estimar el calor específico del agua entre 550 y 650 °C.

$$y = 2,3 \cdot 10^{-5} \cdot T^2 - 0,031649 \cdot T + 13,66842$$

Siendo  $r^2=0,99987$

La expresión anterior permite conocer el valor del calor específico del agua para cualquier temperatura en las condiciones de reacción. Sin embargo, se necesita de valores del mismo a temperaturas más bajas para poder estimar el calor que debe suministrarse a la corriente de alimentación para que alcance las condiciones de reacción mencionadas. Para ello, se ha construido una tabla con los valores del calor específico del agua entre 10 y 650 °C para una presión de 25 MPa y un incremento de temperatura de 1 °C. A partir de la misma podrá estimarse el calor a aportar para calentar la corriente de agua con una aproximación bastante aceptable.

## **1.1.2 FENOL**

El problema con el fenol es la escasa información disponible sobre sus propiedades en rangos alejados de las condiciones ambientales. En el NIST Chemistry WebBook es posible encontrar las

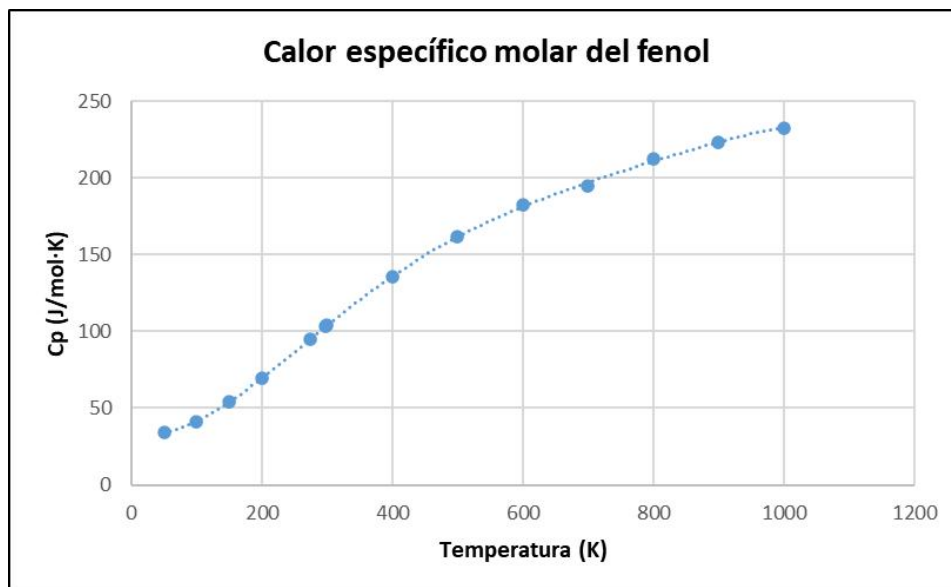
propiedades del agua en casi cualquier condición, pero el fenol está mucho más limitado. A continuación se muestra la Tabla A1 que recoge el valor del calor específico del fenol a distintas temperaturas y a presión atmosférica:

*Tabla A1: Calor específico del fenol a distintas temperaturas y 1 atm*

Propiedades fenol	
Tª (K)	Cp (J/mol·K)
50	33,91
100	41,38
150	54,19
200	69,65
273,15	94,61
298,15	103,22
300	103,86
400	135,79
500	161,91
600	182,48
700	194,84
800	212,14
900	223,19
1000	232,49

No son muchos puntos y, además, los valores anteriores son a presión atmosférica. Sin embargo, en condiciones estándar, el calor específico del agua es el cuádruple que el del fenol, por lo que aunque el valor de este último no sea totalmente exacto, al existir una diferencia tan grande con respecto a la del otro componente, debe realizarse el cálculo contabilizando dicha propiedad del fenol en vez de aproximarla a la del agua.

El Cp del agua a 1 bar y 25 °C es de 4,18 J/g·°C y a la misma temperatura y 250 bar, su valor es de 4,11 J/g·°C. Por tanto, puede aproximarse el Cp del fenol para una temperatura a presión ambiente, al valor que tendría a 250 bar y la misma temperatura. A continuación, debe calcularse una expresión para obtener el Cp del fenol a cualquier temperatura, para ello, se muestra en la Figura A4 la variación del Cp del fenol con respecto a la temperatura:



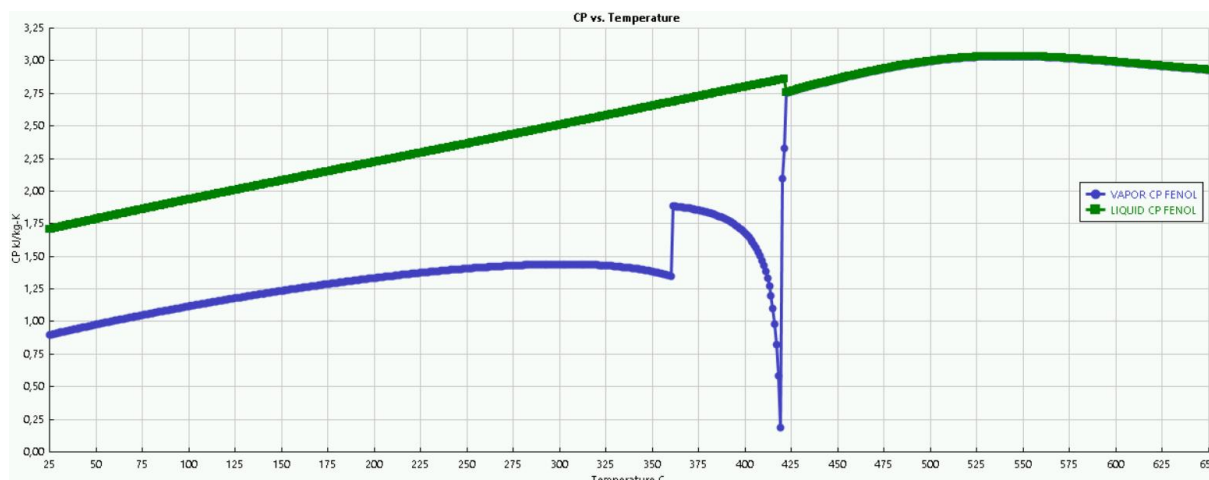
*Figura A4: Variación del calor específico del fenol con la temperatura*

La ecuación de ajuste para la curva de la anterior figura A4 es la siguiente:

$$-1,4107 \cdot 10^{-12} \cdot T^5 + 4,3160 \cdot 10^{-9} \cdot T^4 - 4,86184 \cdot 10^{-6} \cdot T^3 + 2,2732 \cdot 10^{-3} \cdot T^2 - 0,1191 \cdot T + 34,918$$

Siendo  $r^2=0,99987$

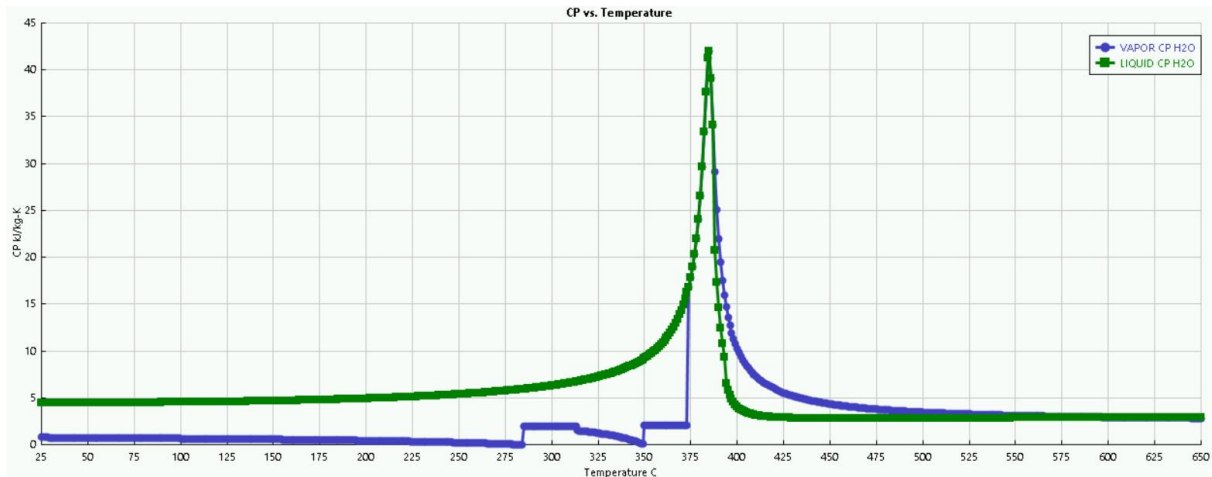
El problema de este cálculo es el punto crítico del fenol, el cual se encuentra a 419 °C y 60,5 atm. Es imposible determinar cómo variarán las propiedades fenol al superar dicho punto (y en las inmediaciones del mismo) conociendo, únicamente, cómo evoluciona dicha propiedad a presión ambiente. Por tanto, se necesita otro método para estimar dicha propiedad. Se atenderá al cálculo de esta propiedad, así como la densidad molar, mediante el uso del simulador Aspen Plus con el método PR-BM (Peng-Robinson-Boston Mattias, recomendado en la bibliografía para fluidos supercríticos) para la estimación de propiedades. De esta forma, se obtiene la Figura A5 que se muestra a continuación:



*Figura A5: Evolución del Cp del fenol con la temperatura a 25 MPa, Aspen Plus*

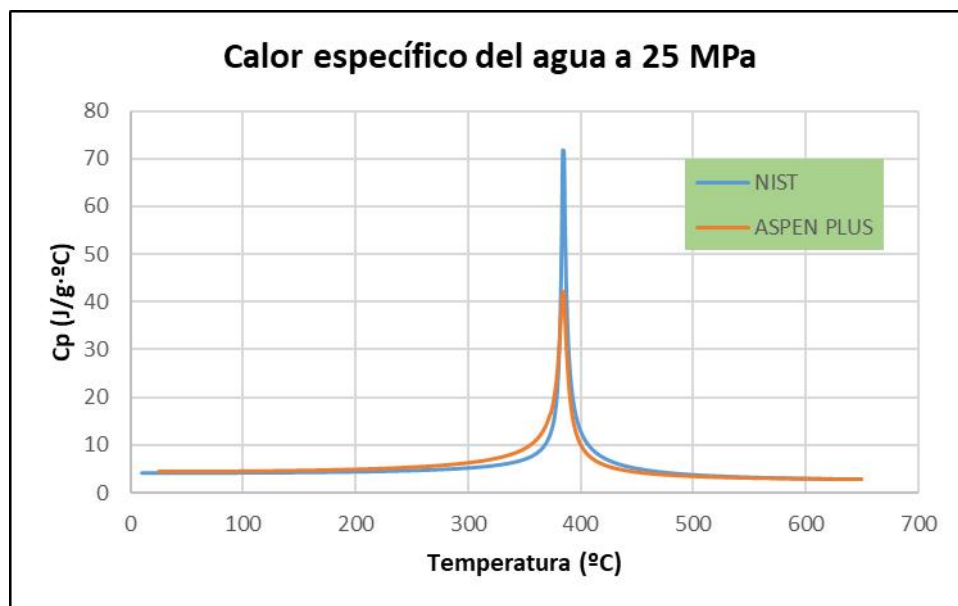


En la anterior Figura A5 se evidencia el cambio de tendencia de la capacidad calorífica del fenol una vez alcanzada la temperatura crítica. Como el simulador permite obtener tantos puntos como se solicite, no será necesario realizar ningún ajuste polinómico a la curva mostrada en la Figura A5. Es evidente que deben tomarse los valores para líquido antes del punto crítico y para gas después del mismo. En este caso, después del punto crítico, el simulador ofrece valores idénticos para el vapor y el líquido, pero esto no es siempre así. Además, para comprobar que el simulador ofrece valores razonables se mostrará, a continuación, la Figura A6 con los valores para el agua con el objetivo de compararlos con los de la Figura A3:



*Figura A6: Evolución del Cp del agua con la temperatura a 25 MPa, Aspen Plus*

Si se toman los valores del líquido para temperaturas inferiores a la crítica y del vapor para las superiores a esta, se obtiene la gráfica mostrada en la Figura A7:



*Figura A7: Comparación de los ofrecidos para el Cp del agua por el NIST y Aspen Plus*

Resulta evidente que no son gráficas idénticas, por lo que el simulador no es capaz de estimar de forma perfecta las propiedades de los compuestos en las inmediaciones de su punto crítico. Sin embargo, para el resto de temperaturas las curvas están prácticamente solapadas, lo que lleva a pensar que es una aproximación bastante aceptable, sobre todo para el fenol, compuesto sobre el que apenas existen datos en este rango.

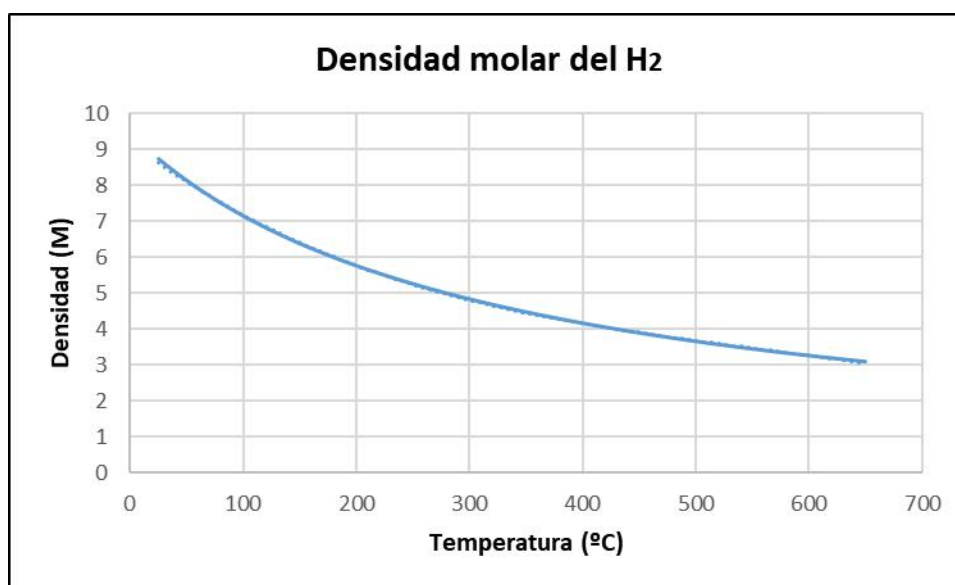
Por tanto, para aquellos compuestos en los que no se encuentren sus propiedades completas en el NIST, los datos ofrecidos por el simulador serán una aproximación más que aceptable.

## 1.2 PROPIEDADES DE LOS PRODUCTOS

Como se detallará en el Anexo 2, los productos de la reacción son H<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub> y CO, de forma que la corriente de salida estará formada por agua y estos productos gaseosos. Se pretende diseñar un equipo de integración energética para aprovechar el calor del efluente del reactor, por lo que se precisa de la estimación del calor específico y densidad de estos gases en la corriente de salida. Las propiedades se estimarán en el rango de operación, es decir, a 25 MPa y temperaturas entre 25 y 650 °C.

### 1.2.1 HIDRÓGENO

A continuación, se muestra la Figura A8, correspondiente a la variación de la densidad molar del H<sub>2</sub> con la temperatura:



*Figura A8: Variación de la densidad del H<sub>2</sub> con la temperatura*

La ecuación de ajuste para la curva de la anterior figura A8 es la siguiente:

$$-2,2125 \cdot 10^{-8} \cdot T^3 + 3,5675 \cdot 10^{-5} \cdot T^2 - 2,3291 \cdot 10^{-2} \cdot T + 9,1750$$

$$\text{Siendo } r^2=0,99965$$

A continuación, se muestra la Figura A9, correspondiente a la evolución del calor específico del H<sub>2</sub> con respecto a la temperatura:

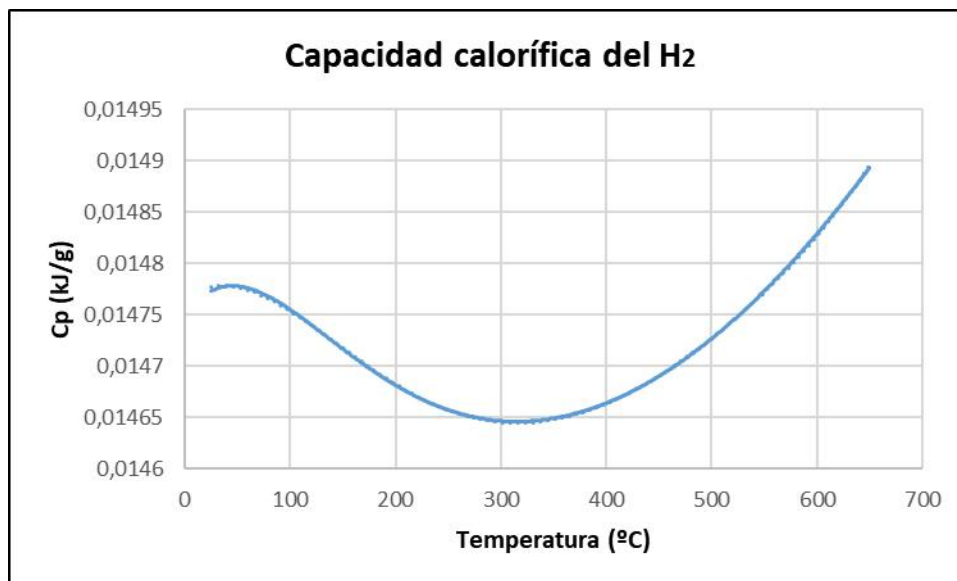


Figura A9: Variación de la capacidad calorífica del H<sub>2</sub> con la temperatura

En la anterior Figura A9 se observa que la capacidad calorífica del hidrógeno varía muy poco con la temperatura. Además, por la forma de la curva, una aproximación razonable sería tomar 0,01475 kJ/g como valor constante del Cp de dicho gas.

## 1.2.2 DIÓXIDO DE CARBONO

A continuación, se muestra la Figura A10, correspondiente a la variación de la densidad molar del H<sub>2</sub> con la temperatura:

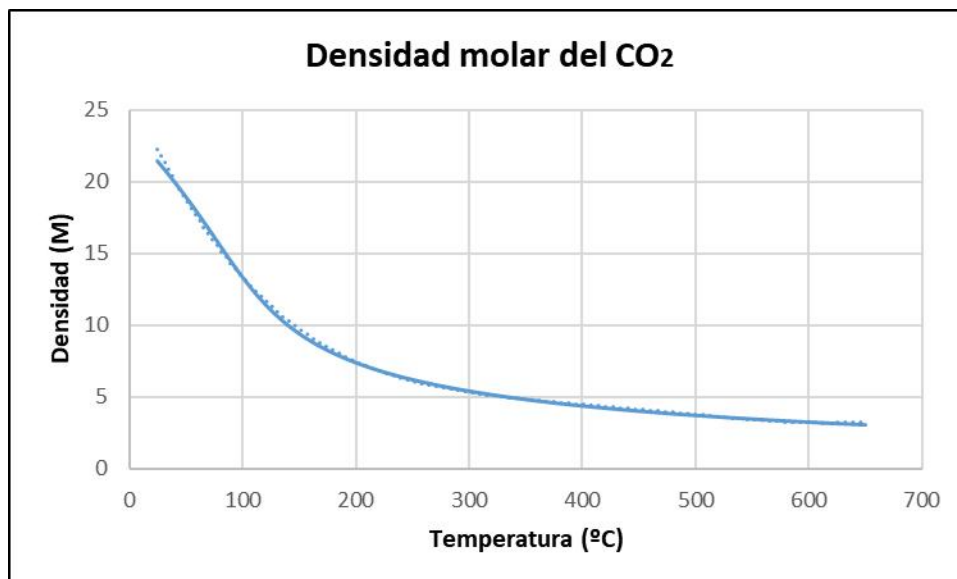
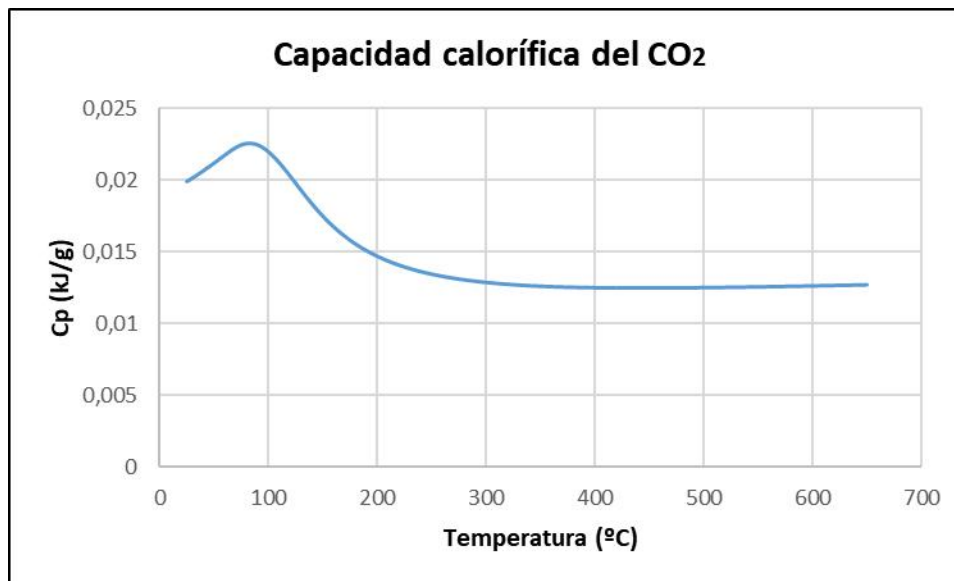


Figura A10: Variación de la densidad molar del CO<sub>2</sub> con la temperatura

$$5,0150 \cdot 10^{-10} \cdot T^4 - 9,0114 \cdot 10^{-7} \cdot T^3 + 6,0102 \cdot 10^{-4} \cdot T^2 - 0,1834 \cdot T + 26,4905$$

Siendo  $r^2=0,99868$

En la siguiente figura (Figura A11) se muestra la evolución de la capacidad calorífica del CO<sub>2</sub> con respecto a la temperatura:



*Figura A11: Variación de la capacidad calorífica del CO<sub>2</sub> con la temperatura*

Ninguna ecuación polinómica de orden relativamente bajo se ajusta de forma aceptable a la curva de la figura anterior, de forma que, para tener una expresión que permita estimar la capacidad calorífica de este gas de forma continua, se dividirá la curva en dos tramos, uno de 25 a 225 °C y otro hasta los 650 °C requeridos.

La expresión del primer tramo es la siguiente:

$$-6,955 \cdot 10^{-13} \cdot T^5 + 4,387 \cdot 10^{-10} \cdot T^4 - 9,733 \cdot 10^{-8} \cdot T^3 + 8,593 \cdot 10^{-6} \cdot T^2 - 2,610 \cdot 10^{-4} \cdot T + 0,02249$$

Siendo  $r^2=0,99894$

La expresión para el segundo tramo:

$$2,0551 \cdot 10^{-13} \cdot T^4 - 4,2495 \cdot 10^{-10} \cdot T^3 + 3,3107 \cdot 10^{-7} \cdot T^2 - 1,1436 \cdot 10^{-4} \cdot T + 0,02718$$

Siendo  $r^2=0,99895$

De esta forma, según la temperatura a la que se requiera, la capacidad calorífica del dióxido de carbono se estimará con una expresión u otra.

### 1.2.3 MONÓXIDO DE CARBONO

En la base de datos del NIST no se ofrecen datos del CO de forma continua por encima de los 227 °C, pero sí se muestra la ecuación de Shomate, la cual es útil para estimar la capacidad calorífica del gas a presión atmosférica. Su expresión es la siguiente:

$$C_p = A + B \cdot T + C \cdot T^2 + D \cdot T^3 + E/T^2$$

Siendo, para temperaturas entre 298 y 1300 K:

$$-A=25,56759$$

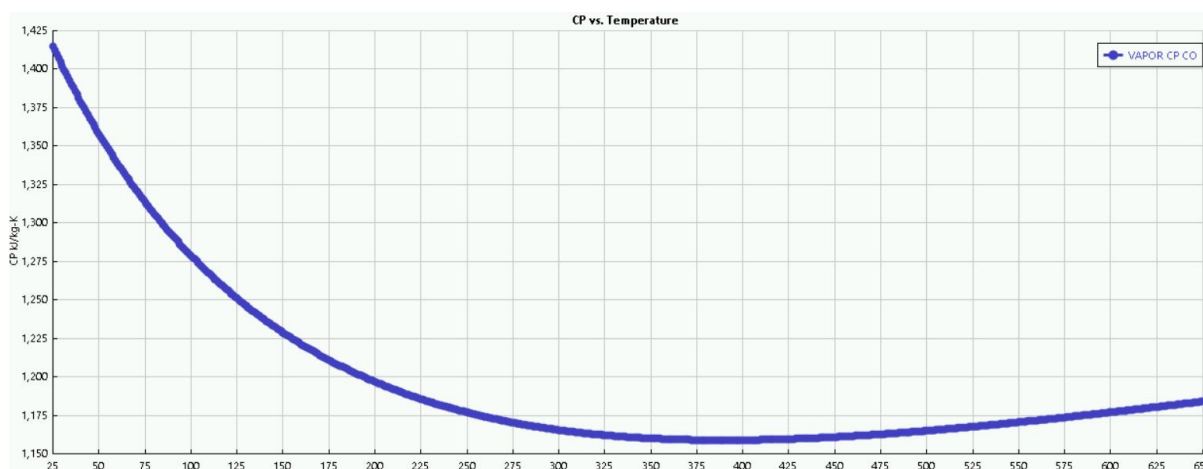
-B=6,096130

-C=4,054656

-D=-2,671301

-E=0,131021

Sin embargo, como se indicó para el caso del fenol, el punto crítico del monóxido de carbono (-140 °C y 35 bar) se supera en las condiciones de operación, por lo que no es posible aproximar sus propiedades a la que presentan a presión atmosférica. Se tomarán, por tanto, las que se muestran en Aspen. En este caso, como en todo el rango de temperatura el CO se encuentra en condiciones supercríticas, se tomará únicamente la curva correspondiente al vapor. A continuación, se muestra en la Figura A12 la curva mencionada:

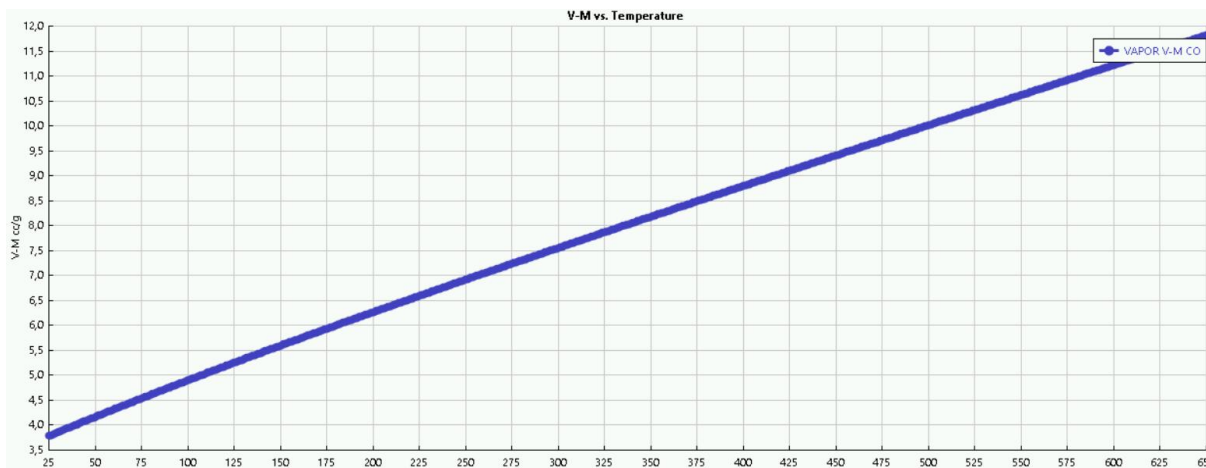


*Figura A12: Evolución del Cp del CO con la temperatura a 25 MPa, Aspen Plus*

Al igual que ocurría para el caso del fenol, el simulador permite obtener el valor en cualquier punto, por lo que no se precisa de una función para calcularlo.

El caso de la densidad molar es bastante parecido. En el libro de química del NIST se recogen datos para el CO hasta 227 °C, por lo que estimar esta propiedad a 650 °C es totalmente inviable, ya que no existe evidencia alguna de que la tendencia de evolución de la densidad con la temperatura vaya a mantenerse con una variación de cientos de grados centígrados. Además, es una propiedad que depende, en gran medida, de la presión, por lo que tampoco sería posible aproximarla a su valor a presión atmosférica. Se tomará, por tanto, la misma solución que para la capacidad calorífica obteniendo los datos de la densidad a partir de Aspen Plus.

A continuación, se muestra la Figura A13 que recoge la variación del volumen específico del CO con la temperatura a 25 MPa:

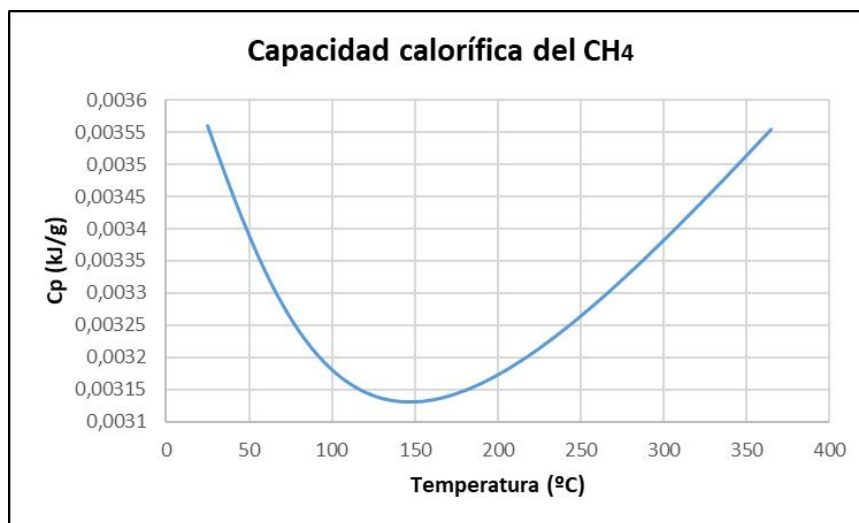


*Figura A13: Variación del volumen específico del CO con la temperatura a 25 MPa, Aspen Plus*

Como se observa en la anterior Figura A13, a partir del simulador se obtienen valores del volumen específico y estos se pasarán a densidad molar.

## 1.2.4 METANO

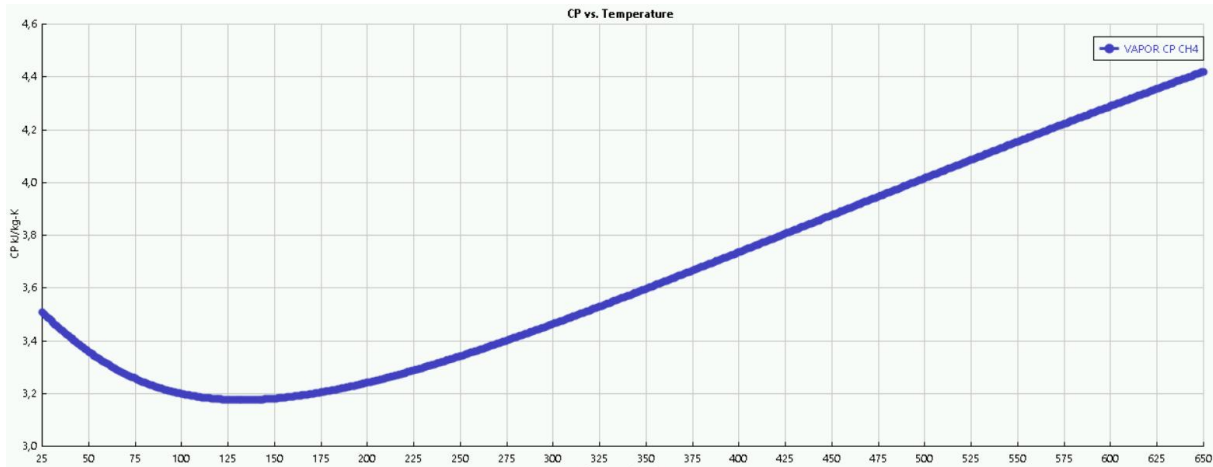
Para este gas, la situación es idéntica al caso del monóxido de carbono, se recogen las propiedades del metano hasta 351 °C, además, el valor del Cp experimenta tendencias cambiantes con un mínimo muy marcado como se muestra en la Figura A14:



*Figura A14: Variación de la capacidad calorífica del CH<sub>4</sub> con la temperatura*

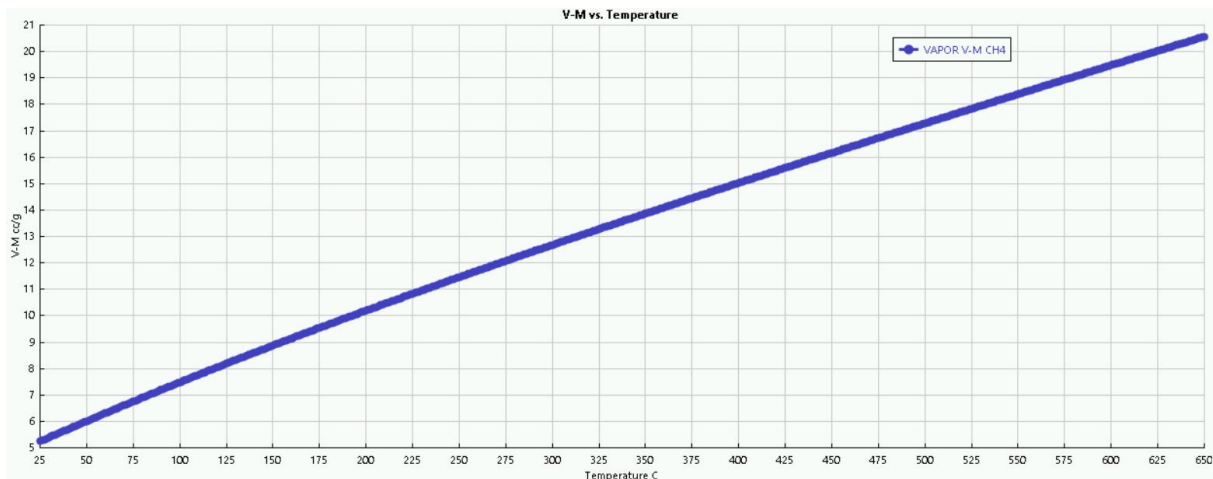
Como se observa en la anterior Figura A14, es inviable intentar predecir como evolucionará la capacidad calorífica del metano para temperaturas superiores a 351 °C. Además, como el punto crítico del metano (-82,5 °C y 4,5 MPa) es ampliamente superado en las condiciones en las que el efluente abandona el reactor, se realizará la misma aproximación que para el Cp del monóxido de carbono en el apartado anterior, se tomarán los valores del simulador atendiendo únicamente a la fase vapor. A

continuación se muestra la Figura A15 que recoge la variación de la capacidad calorífica del CH<sub>4</sub> con la temperatura a 25 MPa:



*Figura A15: Variación de la capacidad calorífica del CH<sub>4</sub> con la temperatura, Aspen Plus*

Para la densidad molar se procederá del mismo modo. A continuación, se muestra en la Figura A16 la evolución del volumen específico del metano con la temperatura a 25 MPa:



*Figura A16: Variación del volumen específico del CH<sub>4</sub> con la temperatura, Aspen Plus*

## 2. CINÉTICA DE REACCIÓN

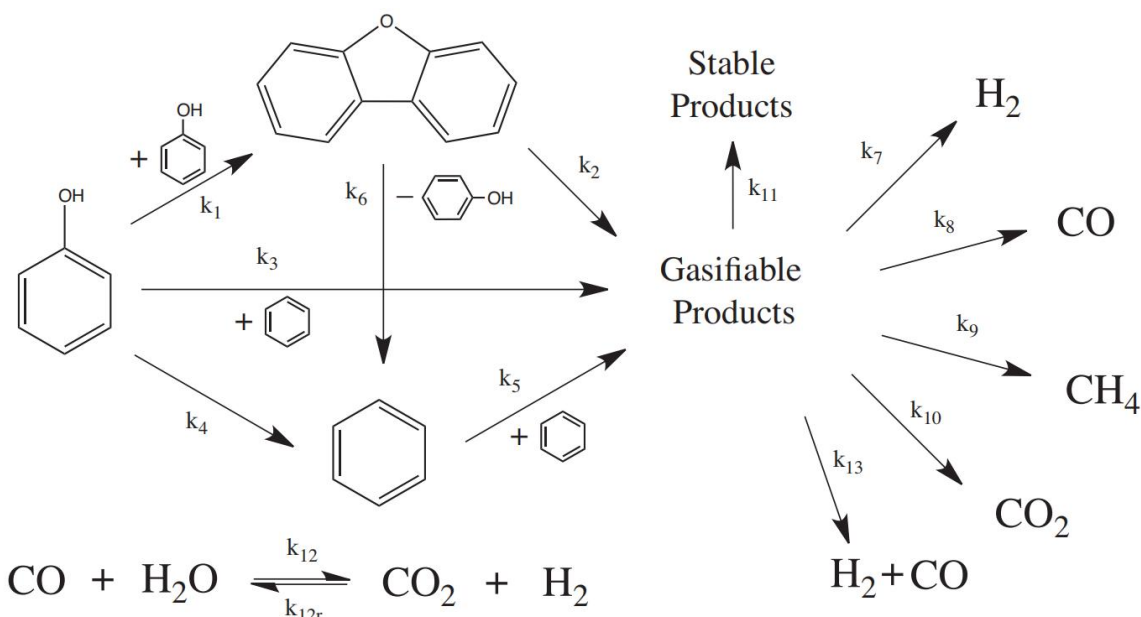
En el presente anexo se redactará el proceso de selección de la cinética, así como los productos mayoritarios de la reacción completa tras una revisión de distintos artículos sobre la GASC de fenol.

### 2.1 SELECCIÓN DE LA CINÉTICA

A continuación, expondrán varias cinéticas para el proceso de GASC de fenol propuestas por distintos autores, con el fin de explicar la serie razones que han llevado a la elección de una cinética sobre el resto.

El primer paso no es otro que reunir distintos estudios de GASC de fenol y los mecanismos de reacción propuesto por los autores. La GASC es un proceso de complejo estudio, por lo que es de esperar que distintos autores, con distintos reactores y condiciones de reacción, sugieran mecanismos y cinéticas muy distintas entre sí. Son estudios con gran rigurosidad, por lo que los productos observados, así como compuestos intermedios, sí serán bastante parecidos (salvo grandes diferencias en las condiciones de reacción), pero, los mecanismos y cinéticas que mejor se ajusten en un caso, no encajarán en otro de condiciones distintas. Por tanto, la cinética seleccionada para el diseño del reactor en el presente TFG, procederá de un artículo en el que se hayan ensayado las condiciones más similares posibles, es decir, un reactor tubular en el que se produzca la descomposición completa del fenol hasta productos gaseosos, primándose la producción de hidrógeno.

Todos los autores concuerdan en que el mecanismo de descomposición del fenol en estas condiciones (GASC) es muy complejo e involucra un gran número de reacciones. Huelsman y Savage (2013) proponen el mecanismo de la Figura A17:



*Figura A17. Esquema simplificado propuesto por Huelsman y Savage para el estudio cinético de la GASC del fenol, [2]*



Los autores posteriores a la publicación de este esquema presentan ecuaciones cinéticas para la descomposición del fenol, pero en cuanto al mecanismo de reacción, se limitan a hacer mención del artículo del que procede dicho esquema (Figura A17), sin proponer ningún otro mecanismo de reacción.

El mecanismo de descomposición del fenol mediante GASC presente en la Figura A17 contiene un gran número de reacciones distintas y es previsible que, en el caso de reacciones paralelas, unas estén más favorecidas que el resto en determinadas condiciones. Por tanto, será necesario trabajar en aquellas condiciones en las que se encuentren favorecidas las reacciones que generen H<sub>2</sub> y CH<sub>4</sub> (gases con valor energético) por encima de otros gases. El tipo de reactor, presión, temperatura, presencia de catalizador y concentración del reactivo afectan en gran medida al resultado del proceso de GASC.

Huelsman y Savage [3] comentan que la temperatura es extremadamente importante en el proceso de GASC. A 500 °C se obtuvieron conversiones muy bajas del fenol y poca producción gas, siendo la mayor parte de este CO y CO<sub>2</sub>. Esto sugiere que la energía térmica no es suficiente para romper los compuestos líquidos intermedios, limitando así la formación de CH<sub>4</sub> y H<sub>2</sub>. Al aumentar la temperatura, los enlaces de los compuestos intermedios son más fáciles de romper, lo cual se traduce en un aumento de las fracciones de CH<sub>4</sub> y H<sub>2</sub>. Por debajo de los 600 °C la producción de hidrógeno es mínima.

A continuación, se muestra la Tabla A2, donde se expondrán distintos artículos y cinéticas que fueron revisadas durante las primeras etapas del presente proyecto.

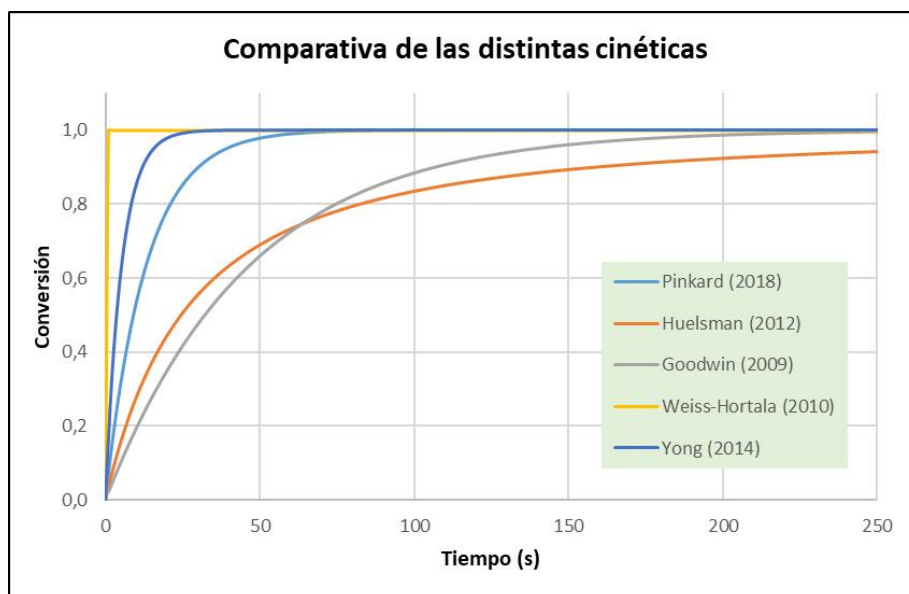
*Tabla A2: Resumen preliminar de los artículos estudiados*

Autor	Tipo de reactor	T <sup>a</sup> estudiada (°C)	Nº de mecanismos	Catalizador
Pinkard (2018)	Tubular continuo	370-450	1	-
Weiss-Hortala (2010)	Tubular continuo	400-560	-	KHCO <sub>3</sub>
Yong (2014)	Discontinuo	370-450	1	-
Goodwin (2009)	Discontinuo	600-720	1	KHCO <sub>3</sub>
Huelsman (2012)	Tubular discontinuo	500-700	2	-
Huelsman (2013)	Tubular discontinio	500-700	13	-

Yong [4] trabaja con reactor en continuo de 1 mm de diámetro interno en condiciones supercríticas (25 MPa 370-450 °C con tiempos entre 0,5-100 s), sin embargo, estas temperaturas no abarcan el rango que interesa para la producción de H<sub>2</sub>. Ocurre lo mismo para los casos de Pinkard y Weiss-Hortala [5], los cuales se tratan de estudios realizados a temperaturas demasiado bajas.

Huelsman y Savage [2] proponen, además del mecanismo de reacción presente en la Figura A17, valores numéricos para todas las constantes representadas, generando de esta forma un mecanismo de reacción completo con 13 etapas, sin embargo, es un cálculo bastante tedioso por lo que, en principio, se descarta como modelo cinético y se buscan otras opciones.

A continuación, se muestra la Figura A18 con una comparativa de la conversión esperada en función del tiempo para cada una de las cinéticas de la Tabla A2, estudiadas todas a 650 °C:



*Figura A18. Comparativa de la conversión predicha por las distintas cinéticas consideradas inicialmente para la GASC de fenol*

En la anterior Figura A18 se evidencia que aquellas cinéticas provenientes de estudios a temperaturas más bajas se desmarcan completamente de la tendencia de los dos estudios realizados por encima de los 600 °C (temperatura a la que la producción de H<sub>2</sub> comienza a darse de forma apreciable). Esto es, además, algo totalmente lógico, pues es de esperar que en otro rango de temperaturas primen distintos mecanismos de descomposición del fenol.

Tras estos descartes iniciales solo quedan dos cinéticas, la propuesta por Goodwin [6] basada en un mecanismo de descomposición de una única etapa o la presentada por Huelsman y Savage [3] basada en una etapa de descomposición térmica y otra hidrotérmica. Ninguno de estos reactores se ajusta al reactor que se busca diseñar, sin embargo, es más correcto tomar la cinética de uno de estos autores, ya que aunque el reactor sea diferente, es de vital importancia seleccionar una cinética que se haya estudiado en el rango de temperatura en el que se obtiene H<sub>2</sub> durante la GASC. Esto es debido a que el mecanismo de reacción es diferente a temperaturas más bajas. Si uno de los objetivos es la generación de H<sub>2</sub> no pueden tomarse datos de cinéticas en los que este no es un producto considerable. Debido a que el reactor ensayado por Goodwin [6] se estudiaba en presencia de KHCO<sub>3</sub> como catalizador, finalmente queda descartado.

Se trabajará, por tanto, con la cinética propuesta por Huelsman y Savage [3] (ecuación 1) para la desaparición del fenol hasta la formación de productos gaseosos, la cual está basada en dos

mecanismos, descomposición térmica y descomposición hidrotérmica, cuyos parámetros cinéticos aparecen recogidos en la Tabla A3:

$$-\frac{d[\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}]}{dt} = k_1(T)[\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}]^a[\text{H}_2\text{O}]^b + k_2(T)[\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}]^c[\text{H}_2\text{O}]^d \quad (1)$$

*Tabla A3: Parámetros cinéticos propuestos por Huelsman y Savage [3]*

<i>a</i>	1.73
<i>b</i>	-16.60
<i>c</i>	0.92
<i>d</i>	1.39
$A_1$ (mol <sup>15.87</sup> L <sup>-15.87</sup> s <sup>-1</sup> )	$1.92 \times 10^{15}$
$A_2$ (mol <sup>1.47</sup> L <sup>-1.47</sup> s <sup>-1</sup> )	$4.42 \times 10^{11}$
$E_{a1}$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	125
$E_{a2}$ (kJ mol <sup>-1</sup> )	280
$R^2$	0.985

De esta forma quedan acotadas la presión y la concentración inicial de fenol al rango ensayado por los autores de la cinética en cuestión. Huelsman y Savage [3], al igual que la mayoría de autores, ensayaron en condiciones de presión entre 25 y 34,5 MPa y valores de concentración de fenol entre 0,02 y 0,2 M.

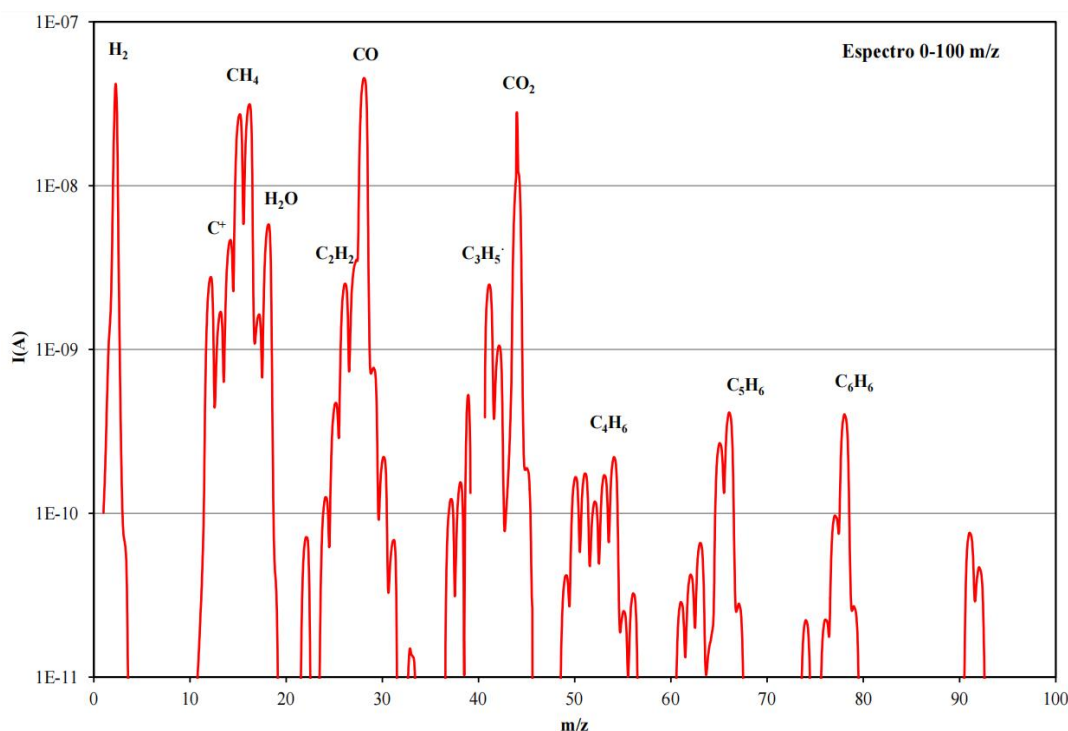
## 2.2 PRODUCTOS DE REACCIÓN

El objetivo principal de la planta que se pretende diseñar es la degradación del fenol, sin embargo, es de vital importancia conocer cuáles serán los productos de dicha reacción. El proceso no tendría sentido si la GASC de fenol genera corrientes de productos más tóxicos y difíciles de manejar que el propio fenol. Además, aunque el principal objetivo sea la eliminación de un componente, industrialmente siempre se estudiará la posibilidad de maximizar los productos con valor económico.

Huelsman y Savage [2] proponen que el benceno y el dibenzofurano son los únicos productos primarios y su formación se da cuando solo existe fenol y agua. La GASC de dibenzofurano es muy similar a la del fenol, de forma que se obtiene a partir de ella mayoritariamente benceno, además de otros productos minoritarios. El caso de la GASC de benceno es más interesante para el proceso, ya que se generan varios componentes líquidos minoritarios y H<sub>2</sub>. Huelsman y Savage [3] exponen que la consecución completa del proceso conlleva la aparición de únicamente productos gaseosos, entre los que destacan H<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, CO y CO<sub>2</sub>.

Jennifer Pelaz (2016) estudió mediante espectrometría de masas los componentes presentes en el efluente gaseoso resultante de la GASC de fenol. El primer paso del estudio de las corrientes gaseosas generadas es la identificación de las especies que se producen en la gasificación, es decir, el análisis

cuantitativo y una vez identificadas, se podrá conocer la concentración de cada una de ellas en la mezcla gaseosa producida. A continuación, se muestran en la Figura A19 los espectros de masas de los gases generados en la gasificación de fenol a 700 °C:



*Figura A19: Espectros de masas de los gases generados en la gasificación del fenol a 700 °C con ASC, Jennifer Pelaz 2016 [7]*

Jennifer Pelaz [7] indica que estos espectros fueron repetidos para diferentes presiones, caudales y tiempos de residencia y se comprobó que los picos detectables eran siempre los mismos, aunque la intensidad variaba en función de las condiciones de la GASC. El elevado número de gases producidos dificulta el análisis cuantitativo de todos ellos en cada experimento, por lo que estableció el criterio de que solo se analizaría la concentración de aquellos gases cuya señal fuese como máximo 50 veces inferior a la del producto mayoritario. Los gases que cumplieron este requisito fueron H<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub> y CH<sub>4</sub>. De esta forma, Jennifer Pelaz [7], llega a la misma conclusión sobre los productos gaseosos mayoritarios que otros autores ya mencionados como son Huelsman y Savage (2012 y 2013) o Goodwin (2009).

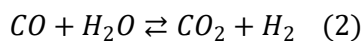
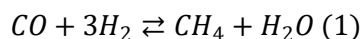
Una vez definidos los productos gaseosos mayoritarios se atenderá al porcentaje de cada uno en el efluente gaseoso. Huelsman y Savage [3] presentan una tabla resumen con los resultados principales de sus ensayos de GASC de fenol, tabla en la que se encuentra la fracción que se observó de cada uno de estos cuatro gases en dicho producto gaseoso. Reagrupando aquellas experiencias realizadas en las condiciones más similares a las del reactor que se pretende diseñar y realizando la media aritmética de los distintos valores, se obtiene la Tabla A4:

*Tabla A4: Fracciones gaseosas experimentales de la GASC de fenol a 25 MPa y 0,2 M de fenol obtenidas por Huelsman y Savage [3]*

Temperatura (°C)	Tiempo (min)	Conversión	H <sub>2</sub>	CO	CH <sub>4</sub>	CO <sub>2</sub>
600	60	0,51	0,277	0,223	0,227	0,303
700	30	0,99	0,33	0,06	0,29	0,32
700	60	1	0,32	0,02	0,33	0,33

Tal y como se aclara y explica en el Anexo 3, la alimentación al reactor del presente TFG se encontrará a 650 °C y 25 MPa con una concentración en fenol 0,2 M en el tanque de alimentación. Por tanto, interesa atender a estudios experimentales que sean lo más parecido posible a dicho sistema. En la Tabla A4 se observa que la fracción de CO en la salida se reduce considerablemente con el transcurso de la reacción, sin embargo, este descenso será importante, pero probablemente no tan grande en el caso a diseñar, puesto que la conversión no sobrepasa el 98%. El caso del CH<sub>4</sub> es justo el contrario, aumenta su fracción en la salida con el transcurso de la reacción, aunque, al igual que para el CO, al no alcanzarse la conversión completa, se espera un aumento menor que en el caso estudiado por los autores. En cuanto a H<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub>, se esperan unos valores en torno al 30% para cada gas, siendo quizás una fracción un poco mayor para el caso del segundo.

Jennifer Pelaz [7] explica estas tendencias cambiantes en las fracciones gaseosas con el transcurso de la reacción como el resultado de otras reacciones paralelas a la GASC como son la metanación (1) o el equilibrio de intercambio gas-agua (2).



Jennifer Pelaz [7] presentó un análisis cuantitativo bastante similar al reunido en la Tabla A4. En él presentaba distintas gráficas con la evolución de la fracción de un gas en el producto gaseoso, con valores bastante interesantes que se tendrán en cuenta. A continuación, se muestra el efecto de la presión y del tiempo de residencia en las concentraciones de CO (Figura A20):

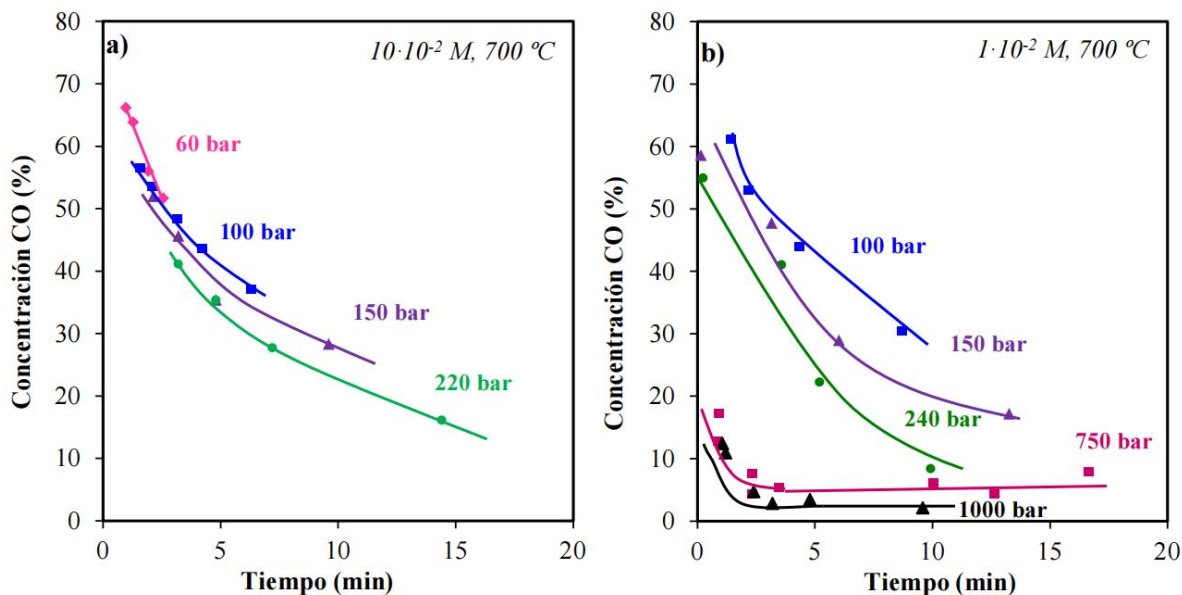


Figura A20: Evolución en la concentración de CO para una concentración inicial de fenol a) 0,1 M y b) 0,01 M, Jennifer Pelaz 2016

La fracción de CO disminuye considerablemente a medida que progresa la reacción, tal como se evidenció en los resultados experimentales presentados por Huelsman y Savage [3]. Esta disminución se atribuye, como se mencionó previamente, a otras reacciones que ocurren en paralelo a la gasificación de fenol y consumen parte del CO producido. En la Figura A20-b se puede observar que para cada presión hay un valor mínimo o estacionario de la concentración de CO. Por tanto, es razonable suponer que la curva correspondiente a 220 bar en la Figura A20-a, que corresponde a un estudio con una alimentación de 0,1 M de fenol, concluye cerca de dicho valor estacionario, que es aproximadamente del 12%. El reactor que se está diseñando tiene un tiempo de residencia superior a 20 minutos y la conversión es casi completa, de forma que ese valor estacionario es útil como aproximación de la fracción de cada gas en la corriente total.

En la siguiente figura (Fig. A21) se muestra el efecto de la presión y del tiempo de residencia en las concentraciones de CO<sub>2</sub>:

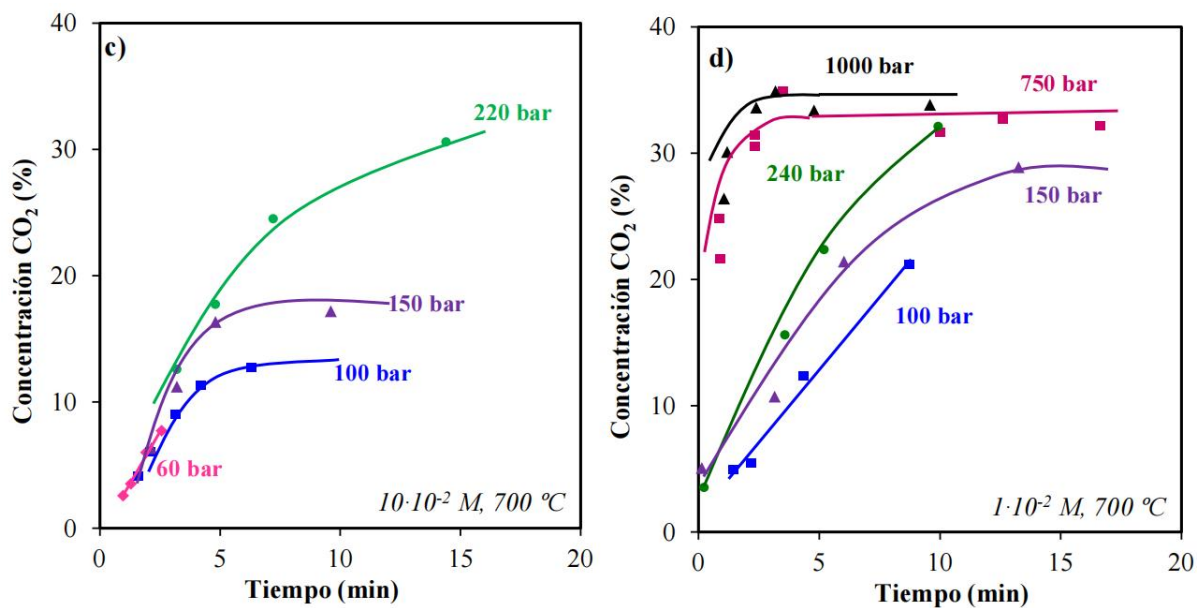


Figura A21: Evolución en la concentración de CO<sub>2</sub> para una concentración inicial de fenol a) 0,1 M y b) 0,01 M, Jennifer Pelaz 2016

En la anterior Figura A21 se observa una situación muy similar a la del caso del CO, en la Figura A21-b se observa un valor estacionario (máximo) en la concentración de CO<sub>2</sub> para cada presión y en la Figura A21-a, que la curva de 220 bar está cerca de dicho valor estacionario, aproximadamente un 32 o 33%. En la siguiente Figura A22 se muestra el efecto de la presión y del tiempo de residencia en las concentraciones de CH<sub>4</sub>:

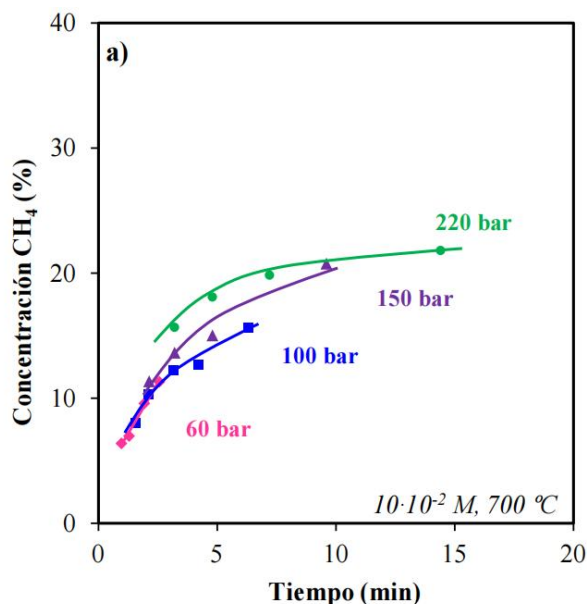
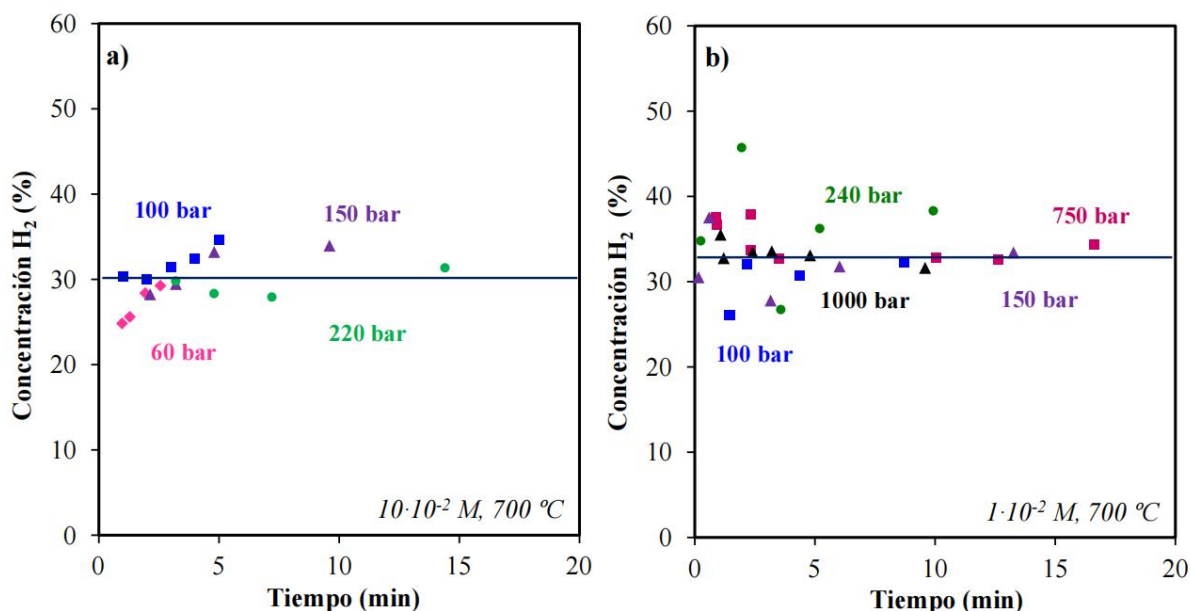


Figura A22: Evolución en la concentración de CH<sub>4</sub> para una concentración inicial de fenol 0,1 M Jennifer Pelaz 2016

En la anterior Figura A22 se observa que la fracción de CH<sub>4</sub> en el producto gaseoso aumenta ligeramente con el tiempo de residencia, probablemente por la reacción de metanación. A favor de esta idea está el hecho de que la reducción de CO es equiparable a la suma de los aumentos de CH<sub>4</sub> y CO<sub>2</sub>,

lo que sugiere que el primero actúa como reactivo para la formación de estos últimos. Por la tendencia de la curva de 220 bar (Fig. A22) puede aproximarse la fracción de CH<sub>4</sub> en el producto gaseoso a un 22%.

La influencia que la presión y el tiempo de residencia tienen sobre la concentración de H<sub>2</sub> en la fracción gaseosa se muestra en la Figura A23:



*Figura A23: Efecto de la presión y del tiempo de residencia en la concentración de H<sub>2</sub> para una concentración inicial de fenol de a) 0,1 M y b) 0,01 M, Jennifer Pelaz 2016*

En la Figura A23 se observa que la concentración de H<sub>2</sub> no varía de forma apreciable con la presión ni con el tiempo de residencia, manteniéndose siempre entre 25 y 35%. Además, según avanza la reacción (mayor tiempo de residencia) los valores son aún más cercanos al 30%, por tanto, esta será la fracción que se considerará para el H<sub>2</sub> en la corriente gaseosa de salida. La suma de las fracciones consideradas para cada gas es menor del 100% por lo que se escalarán de forma proporcional a este valor.

Con lo expuesto anteriormente y los datos de la Tabla A4 se ha creado una aproximación de las fracciones de los distintos gases que cabría esperar en la corriente de salida del reactor diseñado en función de los resultados experimentales de Jennifer Pelaz [7] y Huelsman y Savage [3], respectivamente, estas se recogen en la Tabla A5:

*Tabla A5: Fracciones gaseosas esperadas de la GASC de fenol a 650 °C, 25 MPa y 0,1/0,2 M de fenol basadas en los resultados de Huelsman y Savage y Jennifer Pelaz*



Estudio de los resultados	H <sub>2</sub>	CO	CH <sub>4</sub>	CO <sub>2</sub>	% Total
Huelsman y Savage (2012)	0,3	0,13	0,26	0,31	100%
Jennifer Pelaz (2016)	0,3	0,12	0,22	0,32	96%
	0,313	0,125	0,229	0,333	100%
Resultado promedio	0,306	0,128	0,245	0,322	100%

Una vez conocidas las fracciones molares de los distintos gases como producto final, es necesario estimar cuanta cantidad de gas se genera. El objetivo es conocer el número de moles que se generan de gas por cada mol consumido de fenol y, de esta forma, los moles generados de cada gas. No puede establecerse una relación simple entre los productos gaseosos y los reactivos (agua y fenol) por la multitud de reacciones que tienen lugar y la complejidad que presenta el estudio de una reacción en condiciones tan severas de presión y temperatura.

Para obtener una ecuación estequiométrica aproximada de la reacción, se establecerá una relación másica entre los productos y reactivos conocidos.

La masa de un mol de productos, con la distribución de los mismos anteriormente mencionada, se obtiene de la siguiente forma:

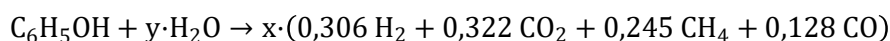
$$\frac{g}{mol \text{ de gas}} = mol H_2 \cdot mM(H_2) + mol CO_2 \cdot mM(CO_2) + mol CH_4 \cdot mM(CH_4) + mol CO \cdot mM(CO)$$

$$\frac{g}{mol \text{ de gas}} = 0,306 \cdot 2 + 0,322 \cdot 44 + 0,245 \cdot 16 + 0,128 \cdot 28 = 22,284 \frac{g}{mol \text{ de gas}}$$

Un mol de fenol supone 94,11 gramos, lo que implica que debe de generarse más de un mol de gas por cada mol de fenol. La relación entre ambos es la siguiente:

$$\frac{mol \text{ de fenol}}{mol \text{ de gas}} = \frac{\frac{g}{mol \text{ de fenol}}}{\frac{g}{mol \text{ de gas}}} = \frac{94,11}{22,284} = 4,22 \frac{mol \text{ de fenol}}{mol \text{ de gas}}$$

De esta forma se conservaría la masa, sin embargo, se sabe que el agua es un reactivo en la reacción, por lo que esta no puede darse con un mecanismo tan simple. La ecuación estequiométrica debe parecerse a la que se presenta a continuación:



Siendo:

- y: coeficiente estequiométrico del agua

- x: moles de gas generados

El balance molar a cada elemento resultaría en:

$$C \rightarrow 6 = x \cdot (0,322 + 0,245 + 0,128) \rightarrow 6 = 0,695x$$

$$O \rightarrow 1 + y = x \cdot (0,322 \cdot 2 + 0,128) \rightarrow 1 + y = 0,773x$$

$$H \rightarrow 6 + 2y = x \cdot (0,306 \cdot 2 + 0,245 \cdot 4) \rightarrow 6 + 2y = 1,590x$$

De esta forma, se obtendría un sistema de 3 ecuaciones con 2 incógnitas y ninguna de las ecuaciones es combinación de las otras por lo que se trata de un sistema incompatible, siendo imposible resolverlo completamente. Se buscarán valores de 'x' e 'y' que ofrezcan resultados similares a ambos lados de las igualdades para obtener una solución de compromiso que, aunque no resuelva el sistema generado, ofrezca resultados válidos para la estequiometría de la reacción. Primero se atenderá a la igualdad que no contiene ambas incógnitas, es decir, el balance al carbono. En el balance mencionado se despeja 'x' resultando en:

$$x = \frac{6}{0,695} = 8,633$$

A partir de este valor de 'x' se despeja y calcula 'y' del balance al oxígeno:

$$y = 0,773 \cdot 8,633 - 1 = 5,673$$

Con estos valores se cumplen los balances al oxígeno y al carbono pero, no el balance global o, en este caso, el balance al hidrógeno. Sin embargo, si el error en términos másicos es menor al 5%, se tomará esta solución como válida.

A continuación, se muestra el balance al hidrógeno:

$$6 + 2y \rightarrow 1,590x$$

$$6 + 2 \cdot 5,673 \rightarrow 1,590 \cdot 8,633$$

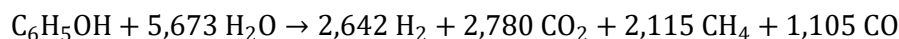
$$17,346 \text{ mol H en reactivos} \rightarrow 13,727 \text{ mol H en productos}$$

El error en cuanto al balance de masa se obtiene de la siguiente forma:

$$\frac{|masa \text{ de productos} - masa \text{ de reactivos}|}{masa \text{ de reactivos}} \cdot 100 = \frac{|192,377 - 196,224|}{196,224} \cdot 100 = 1,96\%$$

Un error del 1,96% es un valor bastante bueno, sobre todo para estudios experimentales en condiciones tan severas, de forma que los métodos analíticos no son tan precisos. Además, solo se han considerado en términos cuantitativos a los productos mayoritarios de la GASC del fenol, por lo que, de haber contabilizado todos los productos, el error sería aún menor.

A continuación, se muestra la ecuación global considerada:



Finalmente, deben atenderse a los productos no gasificados, ya que la conversión no es completa. Huelsman y Savage [3] basaron su cinética para la GASC de fenol en la variación de la concentración de fenol, es decir, la conversión del mismo, por lo que es de esperar que tras una conversión del 98%, en el efluente del reactor se encuentre un 2% de los moles de fenol iniciales. Se considerará que los productos intermedios mayoritarios, como son el benceno y el dibenzofurano, no aparecerán en cantidades apreciables en la corriente que abandona el reactor, de modo que se estudia la conversión completa del fenol hasta productos gaseosos.

### 3. CÁLCULOS REFERIDOS AL REACTOR

En el presente anexo se desarrollarán los balances de materia y energía, así como su resolución, además de la selección de las condiciones de operación para la obtención de un sistema lo más eficiente y parecido al del problema primitivo.

#### 3.1 BALANCE DE MATERIA

Tal y como se especificó en el apartado “Requisitos de diseño”, el reactor que se pretende diseñar será de tipo tubular, por lo que admitirá que el comportamiento del mismo se corresponde con el modelo de reactor flujo en pistón (RFP). Se realiza un balance de materia a un RFP para obtener la ecuación de diseño del reactor y, a partir de esta, poder llevar a cabo el cálculo de sus parámetros de diseño. Mediante el uso exclusivo del balance de materia al reactor puede estudiarse el comportamiento del mismo funcionando isotérmicamente, sin embargo, para el estudio de un reactor que funciona de forma adiabática o conocer el perfil de refrigeración deseado, se requiere de una resolución conjunta de los balances de materia y energía del mismo. El balance de materia al reactor es el siguiente:

$$(Acumulación) = (Entrada) - (Salida) + (Generación) - (Consumo)$$

El reactor opera en régimen estacionario, por lo que se elimina el término de acumulación, además, el balance se encuentra referido al fenol, el reactivo limitante en la reacción, por lo que el término de generación también es nulo:

$$(\cancel{Acumulación}) = (\cancel{Entrada}) - (\cancel{Salida}) + (\cancel{Generación}) - (Consumo)$$

El balance de materia a un RFP debe realizarse sobre un elemento diferencial de volumen,  $dV$ , en la dirección axial al mismo. Dicho diferencial de volumen será una porción del reactor real con la misma área transversal (sección del reactor) y una longitud diferencial (por eso se habla de diferencial de volumen), para realizar posteriormente una integral que recoja todos esos diferenciales de volumen desde la entrada al reactor hasta la salida del mismo. En la Figura A24 se muestra un esquema del BM al elemento diferencial de volumen de un RFP:

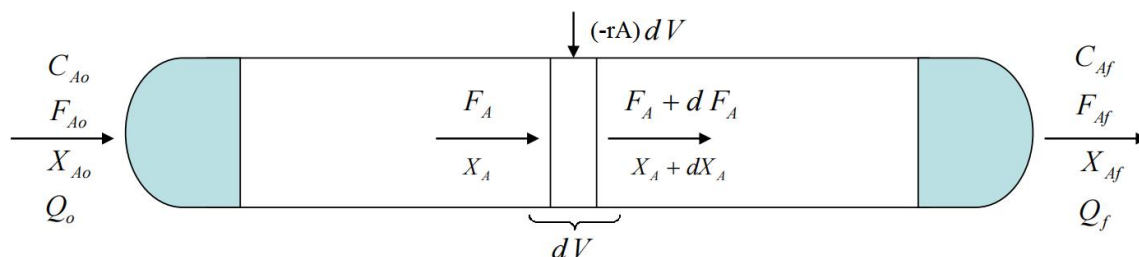


Figura A24: Balance de materia a un elemento diferencial de volumen de un RFP

Por tanto, el balance de materia a un volumen diferencial de un RFP se resume en:

$$(Entrada) = (Salida) + (Consumo)$$

De forma que al sustituir las expresiones correspondientes a cada término anterior resulta en:

$$F_A = F_A + dF_A + (-r_A)dV$$

Reordenando la expresión anterior:

$$-dF_A = (-r_A)dV$$

Una de las especificaciones de diseño es una conversión final respecto al fenol de 0,98, por lo que la expresión anterior debe expresarse en función de la conversión. De esta forma, se llega a la ecuación 2:

$$F_{A0}dX_A = (-r_A)dV \tag{2}$$

Reagrupando términos y tomando integrales para los valores diferenciales, se llega a la ecuación 3:

$$\frac{\tau}{C_{A0}} = \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} \tag{3}$$

Una vez conocida la cinética y, por tanto, la expresión de la velocidad, puede sustituirse el valor de esta última en la ecuación 3 y, a partir de la misma, obtener el tiempo espacial del reactor necesario para la conversión requerida. Sin embargo, por la naturaleza de la cinética y, en específico, los diferentes órdenes parciales de los reactivos involucrados en los dos mecanismos de reacción, este cálculo no es tan sencillo. La cinética seleccionada en el Anexo 2 se muestra a continuación:

$$-\frac{d[C_6H_5OH]}{dt} = k_1(T)[C_6H_5OH]^{1,73}[H_2O]^{-16,6} + k_2(T)[C_6H_5OH]^{0,92}[H_2O]^{1,39}$$

Como se ha mencionado, para el caso de una reacción con un solo reactivo, o de dos con el mismo orden de reacción, resolver la integral sería bastante sencillo. Sin embargo, en la cinética propuesta por Huelsman y Savage [3] se presentan dos mecanismos de descomposición del fenol (descomposición térmica e hidrotérmica), lo que complica el cálculo. Además, los órdenes parciales de los reactivos son muy diferentes entre sí, dificultando de esta forma la agrupación de términos como constantes para la integral. Se resolverá, por tanto, mediante métodos numéricos como el método de Euler a partir de la siguiente EDO:

$$-\frac{dF_A}{dV} = (-r_A)$$

Puesto que aun el caudal de operación no se encuentra definido, es mucho más interesante expresar la ecuación anterior en función del tiempo de reacción (tiempo de residencia). Para ello, se reordenan los términos para dar lugar a la ecuación 4:

$$-\frac{dC_A}{d\tau} = (-r_A) \tag{4}$$

El método de Euler se basa en el cálculo de una curva desconocida que comienza en un punto dado y satisface cierta ecuación diferencial, a partir de un punto de dicha curva y la propia ecuación diferencial. La idea es que a pesar de que la curva es desconocida en un principio, su punto de comienzo, al cual denotamos como  $A_0$ , es conocido. Entonces, de la ecuación diferencial se puede calcular la pendiente de la curva en el punto  $A_0$  y, por lo tanto, la recta tangente a la curva en dicho punto. Ahora, dando un pequeño paso sobre dicha recta (denominado ancho de paso  $h$ ), podemos tomar un nuevo punto  $A_1$  y suponer que dicho punto pertenece a la curva, entonces seguimos el mismo razonamiento aplicado anteriormente y volvemos a calcular la pendiente de la recta tangente a la curva

en el punto  $A_1$ . Luego de varios pasos tendremos formada una curva poligonal  $A_0, A_1, A_2, A_3 \dots$ . Cuanto más pequeño sea el ancho de paso tomado, menor será el error entre la curva generada y la original.

De forma que para el  $n$ -ésimo valor de concentración,  $C_{A_n}$ , el método de Euler significa la siguiente expresión:

$$C_{A_n} = C_{A_{n-1}} - h \cdot (-r_{A_{n-1}})$$

Dado el concepto del ancho de paso,  $h$ , se define la ecuación 5 a partir de la expresión anterior, tomando diferenciales de tiempo iguales al ancho de paso:

$$C_{A_n} = C_{A_{n-1}} - (-r_{A_{n-1}})d\tau \tag{5}$$

### 3.2 BALANCE DE ENERGÍA

Como se mencionó en el apartado anterior, el BM por sí solo es útil para el caso de reactor en funcionamiento isoterma. Sin embargo, las constantes cinéticas y, por tanto, la velocidad de reacción poseen una fuerte relación con la temperatura, por lo que se convierte en necesaria la resolución conjunta del BM y el BE para poder diseñar el reactor.

En el apartado de “Requisitos de diseño” se fijó que el reactor trabajaría de forma adiabática, por lo que se precisa del balance de energía general para un RFP en régimen estacionario y con nulo intercambio de calor con el exterior. Dicho balance se presenta para un diferencial de volumen en la Figura A25:

~~Acumulación de e.c. en el elemento de  $dV$~~  =  $\left\{ \begin{array}{l} \text{Flujo de entrada de e.c. en el elemento } dV \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{Flujo de salida de e.c. en el elemento } dV \end{array} \right\} \pm \left\{ \begin{array}{l} \text{Generación de e.c. por reacción en el elemento } dV \end{array} \right\} \pm \left\{ \begin{array}{l} \text{Flujo de e.c. que se transmite a través del } dV \end{array} \right\}$

~~$m_T \bar{c}_p \frac{dT}{dt}$~~        $-m_T \bar{c}_p dT$        $-\Delta H_R^0 \cdot \frac{(-r_A)}{-v_A} \cdot dV_R$        $dQ$

*Figura A25: Balance de energía a un elemento diferencial de volumen de un RFP [8]*

Este balance resulta en:

$$m_T \bar{c}_p dT = \frac{(-\Delta H_r)(-r_A)}{-v_A} dV$$

Se toman incrementos en los diferenciales y se despeja la temperatura final, obteniendo la ecuación 5:

$$T_f = T_0 + \frac{(-\Delta H_r)(-r_A)}{-v_A \cdot m_T \cdot \bar{c}_p} dV \tag{6}$$

Por último, si se sustituye la ecuación 2 en la 6, obtendremos una expresión que relacione la temperatura con el grado de conversión de la reacción. De esta forma, será posible tomar pequeños incrementos de conversión, a partir de los cuales se podrá conocer la temperatura de la corriente en

esas condiciones y, por tanto, la nueva velocidad de reacción, puesto que se conoce la concentración de los reactivos (la del agua se toma constante) y la temperatura. A continuación, se muestra la ecuación 7:

$$T_f = T_0 + \frac{(-\Delta H_r)F_{A0}(x_A - x_{A0})}{-v_A \cdot m_T \cdot \bar{c}_p} \quad (7)$$

Siendo:

$T_f$ : temperatura final (°C)

$T_0$ : temperatura inicial (°C)

$-\Delta H_r$ : entalpía molar de reacción (kJ/mol)

$F_{A0}$ : caudal molar de fenol (mol/s)

$m_T$ : caudal másico total (g/s)

$C_p$ : capacidad calorífica promedio (kJ/g·°C)

$-v_A$ : diferencia estequiométrica entre reactivos y productos

### 3.3 CONDICIONES DE REACCIÓN

En este apartado del anexo se pretenden explicar las distintas razones que han llevado a la elección de determinados valores para las condiciones iniciales, a partir de las cuales, tiene lugar la resolución de los balances de materia y energía anteriormente expuestos. Para la selección de dichas condiciones se acudirá a distintos artículos que tratan la GASC del fenol, primando el de Huelsman y Savage [3] por ser el artículo en el que se propuso la cinética elegida en el presente TFG.

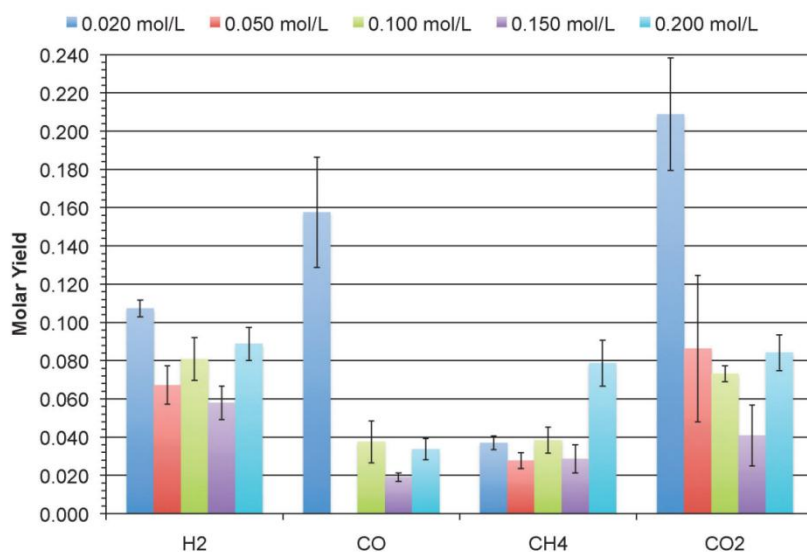
#### 3.3.1 CONCENTRACIÓN INICIAL

La alimentación está formada por agua y fenol, de forma que basta con fijar la concentración de este último y quedará fijada la del agua por las condiciones del medio de reacción en cuanto a temperatura y presión.

La concentración inicial de fenol puede influir en los resultados de la GASC si hay reacciones que no son de primer orden, esto es algo que pasa en el caso en estudio, puesto que la cinética propuesta por Huelsman y Savage [3] incluye dos mecanismos diferentes de desaparición del fenol con, además, órdenes de reacción diferentes para el fenol.

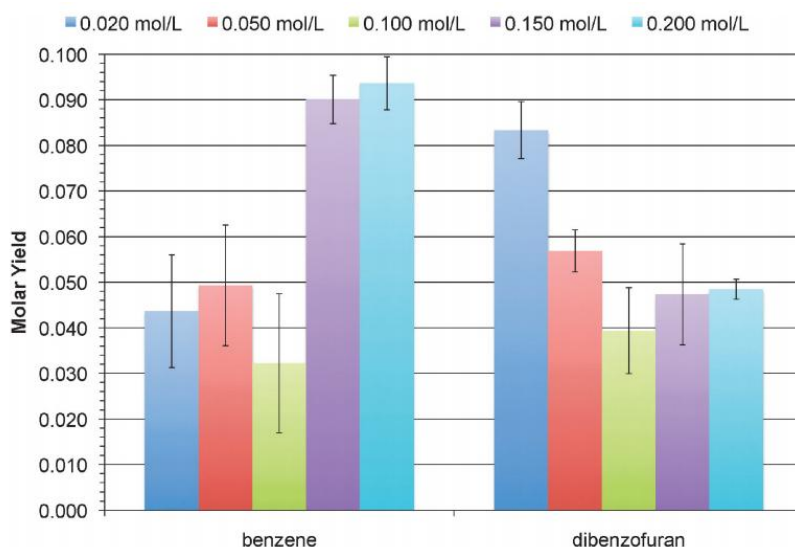
Desde un punto de vista tecnológico, son deseables concentraciones altas porque suelen reducir los costes de capital y de explotación. Si la concentración de la materia prima es muy baja, se requiere más tiempo de procesado para obtener la misma cantidad absoluta de producto. Por otro lado, las altas concentraciones de fenol pueden provocar problemas de deposición y ensuciamiento. En las figuras

A26 y A27 se muestra la influencia de la concentración inicial de fenol sobre los rendimientos molares de los productos gaseosos y líquidos mayoritarios, respectivamente:



*Figura A26: Efecto de la concentración de fenol en los rendimientos del gas de la GASC de fenol  
Huelsman y Savage, 2012*

A concentraciones muy bajas de fenol los rendimientos de CO y CO<sub>2</sub> son muy altos, probablemente por el aumento de reacciones de combustión, que producen estos gases, por la mayor proporción de O<sub>2</sub>/fenol. El rendimiento molar de H<sub>2</sub> no parece verse muy afectado por los cambios en la concentración inicial de fenol, mientras que el rendimiento molar de CH<sub>4</sub> parece aumentar ligeramente. El resultado de aumentar la concentración inicial de fenol es un gas más rico en H<sub>2</sub> y CH<sub>4</sub>, un resultado favorable para la comercialización del proceso.



*Figura A27: Efecto de la concentración de fenol en los rendimientos de los componentes líquidos mayoritarios de la GASC de fenol, Huelsman y Savage, 2012*

En la Figura A27 se observa que a altas concentraciones iniciales de fenol se producen mayores cantidades de benceno, sin embargo, esta tendencia no es general, se observa un mínimo en la generación de este producto líquido, así como para el dibenzofurano, para una concentración 0,1 M. Esto es algo que también se muestra en la Figura A26 donde las tendencias de cada gas no son lineales en cuanto a la concentración inicial de fenol. Huelsman y Savage [3] remarcan esta condición a partir de la cinética que proponen, basada en dos mecanismos, uno que prima para concentraciones bajas de fenol y otro a las altas. Los autores estudiaron la GASC de benceno como parte del proceso de desaparición del fenol y observaron que a partir de la misma se obtienen solo productos gaseosos, por lo que una mayor fracción de benceno durante el transcurso de la reacción no afectará a la distribución de productos gaseosos.

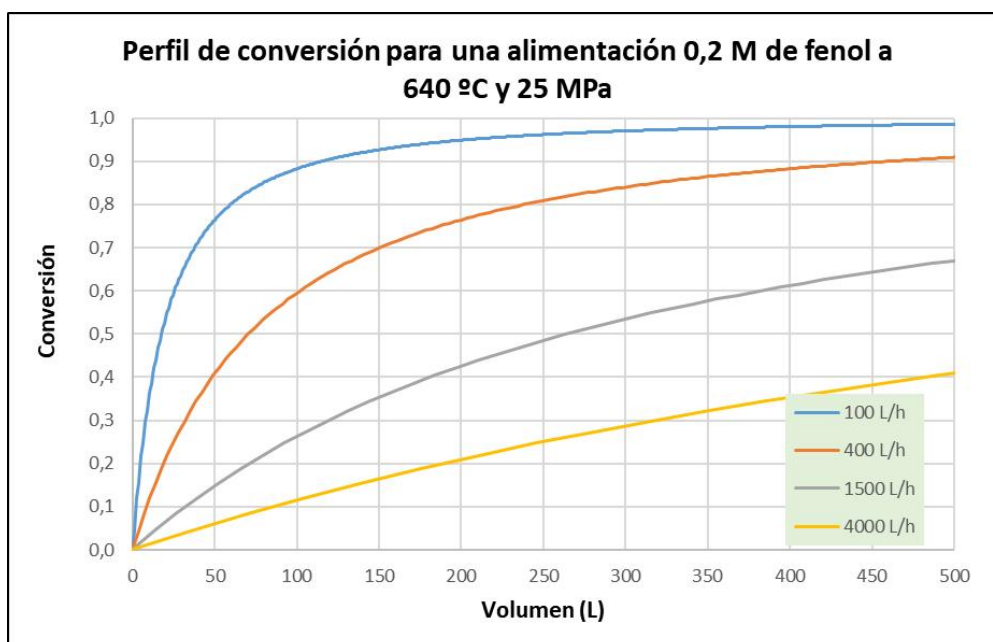
Como se indicó en el Anexo 2 “Cinética de reacción”, se ha supuesto que la GASC se lleva a cabo hasta la degradación total del fenol, de forma que todos los productos son gaseosos. Con el fin de poder trabajar con dicha aproximación, se seleccionarán condiciones iniciales que generen un sistema lo más parecido posible al modelo, sin perder nunca de vista los objetivos de rentabilidad en cuanto a producción. De esta forma, se trabajará con una concentración inicial de fenol de 0,2 mol/L, ya que la tendencia de los datos de los artículos muestra un aumento en la fracción de intermedios líquidos al aumentar la concentración, de forma que de seguir aumentando la concentración inicial es posible que la reacción no avance hasta la formación exclusiva de productos gaseosos.

### **3.3.2 CAUDAL**

El reactor que se pretende construir es para una planta escala piloto, por lo que su tamaño no puede ser excesivamente elevado. Puesto que el tiempo espacial del reactor es la variable de diseño principal, el caudal de alimentación será directamente proporcional al volumen de reactor necesario. El problema con el caudal de operación es que el mismo aumenta más de 15 veces en las condiciones de reacción, de forma que un caudal de 100 L/h en la alimentación, se corresponde con 1593 L/h en el interior del reactor.

En la Figura A28 se muestra una comparativa entre la conversión obtenida en función del volumen del reactor para distintos caudales de operación:





*Figura A28: Perfil de conversión en el interior del reactor para distintos caudales de operación*

En la anterior Figura A28 se aprecia que el caudal de operación no puede ser excesivamente grande, puesto que el volumen de reactor necesario aumenta en la misma medida. Sin embargo, el caudal tampoco puede ser muy pequeño porque el proceso dejaría de tener interés industrial. Además, en las especificaciones de diseño se fijó un diámetro nominal máximo del reactor de 2" (60,32 mm), de modo que se trata de una situación de compromiso entre la longitud del reactor y la productividad del mismo.

A pesar de que se busca la mayor productividad, es un reactor a escala de planta piloto, de forma que el principal objetivo del mismo es verificar que la reacción se da de forma correcta y se obtiene un producto con una concentración muy baja en el residuo (fenol) y alta en productos gaseosos, así como los requerimientos de operación y desgaste de los equipos. Si dicho reactor se llevase a escala industrial, muy probablemente se requiera de temperaturas de operación más elevadas que permitan aumentar en gran medida el caudal de operación sin que el reactor sea desmesuradamente grande.

Con todo lo expuesto anteriormente, es evidente que el caudal de alimentación será bastante menor de 400 L/h porque por el tamaño de la tubería del mismo se precisaría de un reactor de una longitud kilométrica para satisfacer el volumen necesario. Otra condición que debe cumplir el sistema es que el régimen de flujo sea turbulento para poder considerarlo como un RFP y aplicar las ecuaciones de dicho modelo, aunque esto no debería ser un problema debido al aumento del caudal por las condiciones de reacción.

Podría fijarse cualquier caudal medianamente lógico y trabajar a partir del mismo, pero no se encuentra fijado aun el diámetro de la tubería, el cual podría conllevar un reactor demasiado largo o, el caso contrario, que pueda aumentarse el caudal de operación y seguir manteniendo una longitud aceptable. Por tanto, el caudal se fijará más adelante, fijando, eso sí, la longitud del reactor en 400 metros. Siendo esta una longitud bastante grande, pero necesaria para el correcto estudio de escalamiento a una planta piloto. Aun con todo esto, era importante remarcar las condiciones que hacen de esta la mejor solución.

### 3.3.3 PRESIÓN

Huelsman y Savage [3] hablan de un aumento de la producción de H<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub> al aumentar la presión, sin embargo, esa comparativa se realizó entre experiencias con conversiones máximas del 60% por lo que existe la posibilidad de que estas fracciones varíen con el transcurso de la reacción hasta la conversión total. Además, el aumento en la producción de estos gases tampoco es muy significativo, por lo que será importante considerar otros factores como puede ser la velocidad de reacción.

Atendiendo a la cinética seleccionada anteriormente (ecuación 1 y tabla A3 presentes en el Anexo 2), es evidente que uno de los dos mecanismos de reacción se encuentra claramente inhibido a altas concentraciones de agua. Puesto que el agua es el propio medio de reacción, su concentración está definida por las condiciones de reacción, siendo la presión un fuerte condicionante. A continuación, con el fin preservar la coherencia, se muestran la ecuación 1 y la tabla A3 presentes en el Anexo 2.

Cinética de reacción:

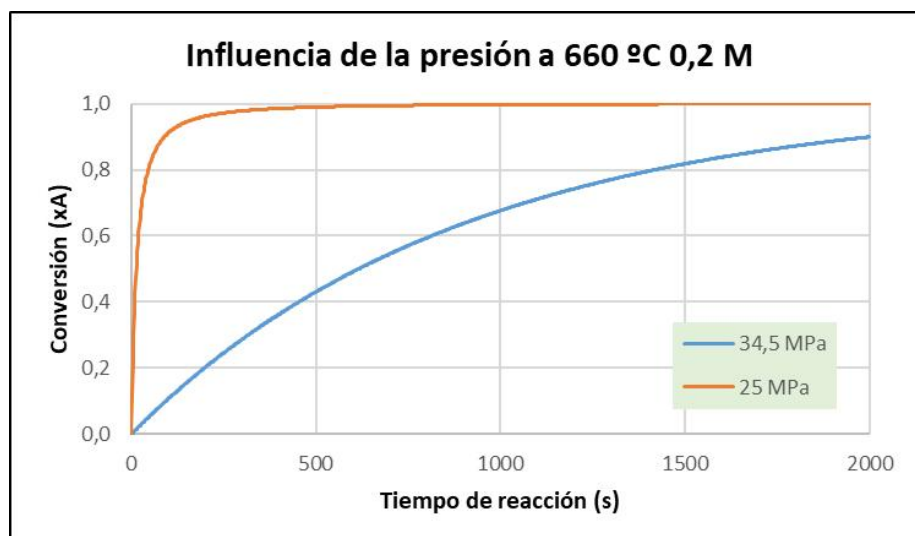
$$-\frac{d[\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}]}{dt} = k_1(T)[\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}]^a[\text{H}_2\text{O}]^b + k_2(T)[\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}]^c[\text{H}_2\text{O}]^d \quad (1)$$

*Tabla A3: Parámetros cinéticos propuestos por Huelsman y Savage [3]*

<i>a</i>	1.73
<i>b</i>	-16.60
<i>c</i>	0.92
<i>d</i>	1.39
<i>A</i> <sub>1</sub> (mol <sup>15.87</sup> L <sup>-15.87</sup> s <sup>-1</sup> )	1.92 × 10 <sup>15</sup>
<i>A</i> <sub>2</sub> (mol <sup>1.47</sup> L <sup>-1.47</sup> s <sup>-1</sup> )	4.42 × 10 <sup>11</sup>
<i>E</i> <sub>a1</sub> (kJ mol <sup>-1</sup> )	125
<i>E</i> <sub>a2</sub> (kJ mol <sup>-1</sup> )	280
<i>R</i> <sup>2</sup>	0.985

Como ya se ha mencionado, el orden de reacción del agua en el primer mecanismo de descomposición del fenol es bastante negativo, de forma que actúa como un fuerte inhibidor para este mecanismo. A medida que aumenta la presión, aumenta la densidad del agua y, por tanto, mayor es la concentración

molar de la misma, lo que implica que la velocidad de reacción sea menor a presiones más altas. Esto se evidencia en la Figura A29:



*Figura A29\*: Efecto de la presión sobre la velocidad de reacción*

\*Se han comparado esos valores de presión porque son los dos únicos que aparecen en todos los estudios cinéticos sobre GASC de fenol.

En la Figura A29 se observa que la diferencia en términos de tiempo de reacción necesario para una conversión dada es abismal entre ambas curvas, por tanto, trabajar a una presión menor permitiría reducir el tamaño del reactor para una misma conversión u obtener un mayor porcentaje de eliminación de fenol en un equipo del mismo tamaño. Otros motivos para no trabajar a presiones excesivamente altas son el desgaste al equipo y la necesidad de un mayor espesor de pared o materiales más costosos para soportar dicha presión.

En resumen, trabajando a 34,5 MPa se obtienen mayores fracciones de gas, pero el aumento del coste de construcción del equipo, así como del de operación (equipos auxiliares como bombas también verían incrementado su coste), hacen inviable la construcción de un reactor a escala industrial que trabaje en ese rango de presión. Por tanto, por ser la presión más estudiada, además de la más baja, y ofrecer resultados bastante satisfactorios, el reactor del presente TFG trabajará a 25 MPa.

### **3.3.4 ENTALPÍA DE REACCIÓN Y TEMPERATURA**

En varios de los artículos consultados se menciona que la reacción es ligeramente endotérmica, pero no se ofrecen valores de la entalpía de reacción. Puesto que se pretende diseñar un reactor adiabático, es indispensable conocer el valor de dicha entalpía para la resolución del BE del sistema. Dado que en ningún caso se han encontrado datos publicados para el valor de la entalpía de reacción de la GASC de fenol, para el presente TFG se ha intentado realizar una estimación de su valor. Tras una exhaustiva

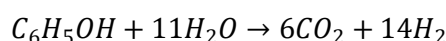
búsqueda en papers de GASC y similares, se conocen las entalpías molares de varias de las reacciones que forman parte del proceso global, pero no todas, de forma que se presentan varias alternativas para estimar dicho valor:

1. Calcularla a través de un ciclo de Hess. Para poder completar dicho ciclo sería necesario conocer entalpías de reactivos y productos mayoritarios en las condiciones de reacción.
2. Obtenerla mediante un programa de simulación. Una alternativa es simular la reacción global en un reactor estequiométrico y conseguir que el programa utilizado ofrezca una estimación del calor de reacción.
3. Determinarlo experimentalmente. Se necesitaría un reactor discontinuo donde llevar a cabo la reacción de forma controlada y medir cuánto baja la temperatura en el fluido, es decir, cuánto calor se retira del medio. No es algo sencillo de montar y menos por las condiciones del proceso, sería más apropiado para un proyecto con una mayor componente experimental, por lo que queda descartada esta opción.

La primera opción fue finalmente descartada por falta de información. Es posible encontrar la entalpía en las condiciones de reacción (600-650 °C, 25 MPa) de algunos de los componentes implicados a través de la base de datos del Instituto Nacional de Estándares y Tecnología, NIST, pero otros, como el metano, aparecen hasta los 350 °C. Los Cp varían bastante con la temperatura, por lo que hacer extrapolaciones a lo largo de ese rango es demasiado aproximar. Sería imposible para el caso del fenol, compuesto que únicamente aparece en condiciones estándar, además de a un pequeño número de temperaturas a 1 atm. Además, no se conoce la estequiometría exacta del proceso, por lo que, con todo esto, completar el ciclo con valores lógicos no es posible.

Obtener la entalpía molar de una reacción como la GASC del fenol a partir de una simulación en Aspen Plus cuenta con el problema de la multitud de reacciones que conforman el proceso global (equilibrio agua-gas, metanación, oxidación parcial...).

Goodwin (2009) propone como ecuación teórica e ideal de la GASC del fenol la siguiente expresión:



Esta ecuación se sustenta en la gasificación total, teórica e ideal hasta la obtención de productos gaseosos. Sin embargo, como se indicó en el Anexo 2.2 “Productos de reacción” varios autores como Huelsman y Savage [3] o Jennifer Pelaz [7] investigaron las fracciones molares de los distintos productos en el gas en condiciones similares a las de la reacción y, como era previsible, combinando estos resultados no se obtiene una ecuación estequiométricamente similar a la indicada anteriormente. De hecho, en el propio Anexo 2.2 se desarrolla la ecuación estequiométrica con la que se trabajará en el presente TFG, sin embargo, dicha ecuación no cumple con la conservación molar, por lo que no

sirve para simulación en un reactor estequiométrico. Por tanto, como primer paso, se decidió estudiar la ecuación ideal para la producción de H<sub>2</sub> propuesta por Goodwin (2009) en el simulador Aspen Plus.

Se optó por el modelo de estimación de propiedades Peng-Robinson, el cual es un modelo semiempírico que modifica el término de presión de atracción de la ecuación de Van der Waals, con el fin de determinar con mayor precisión el valor de la densidad de la fase líquida y el valor de la presión de vapor de sustancias puras y mezclas multicomponentes. Este es un modelo que se utiliza para estimar las propiedades termodinámicas de fluidos supercríticos [9].

Finalmente, se implementó un reactor estequiométrico con el modelo de PR-BM (Peng Robinson con la modificación de Boston Mathias para tener en cuenta la polaridad del agua) como método de estimación de propiedades. Se obtuvo un valor de 525 kJ/mol para la entalpía de reacción ( $\Delta H$ ).

Tras la aplicación de dicho valor en la resolución del balance de energía se concluyó que era un valor demasiado elevado. A continuación, se presenta dicho BE ya expuesto anteriormente como ecuación 7:

$$T_f = T_0 + \frac{(-\Delta H_r)F_{A_0}(x_A - x_{A_0})}{-v_A \cdot m_T \cdot \bar{c}_p} \quad (7)$$

Aún no está fijado el caudal, pero este no influye en el cálculo, ya que tanto el caudal másico como el caudal molar cuentan con esta variable en su definición y se están dividiendo, es decir, sustituyendo cualquier valor para el caudal se llega al mismo resultado. Sí que influye sobre el cálculo la temperatura inicial y si el cálculo se realiza completo o por incrementos de conversión, esto se debe a la variación del Cp del agua con la temperatura. Se realizará el cálculo de ejemplo para un caudal de 0,01 mol/s de fenol a 640 °C.

Los distintos parámetros se han calculado de la siguiente forma:

$$Q = \frac{F_{A_0}}{[C_6H_5OH]_0} = \frac{0,01 \text{ mol } C_6H_5OH/s}{0,2 \text{ mol } C_6H_5OH/L} = 0,05 \text{ L/s}$$

$$m_T = F_{A_0} \cdot mM(C_6H_5OH) + Q \cdot \rho_{H_2O}$$

$$m_T = 0,01 \cdot 94,11 + 0,05 \cdot 997 = 50,79 \text{ g/s}$$

De esta forma ya se puede resolver la ecuación:

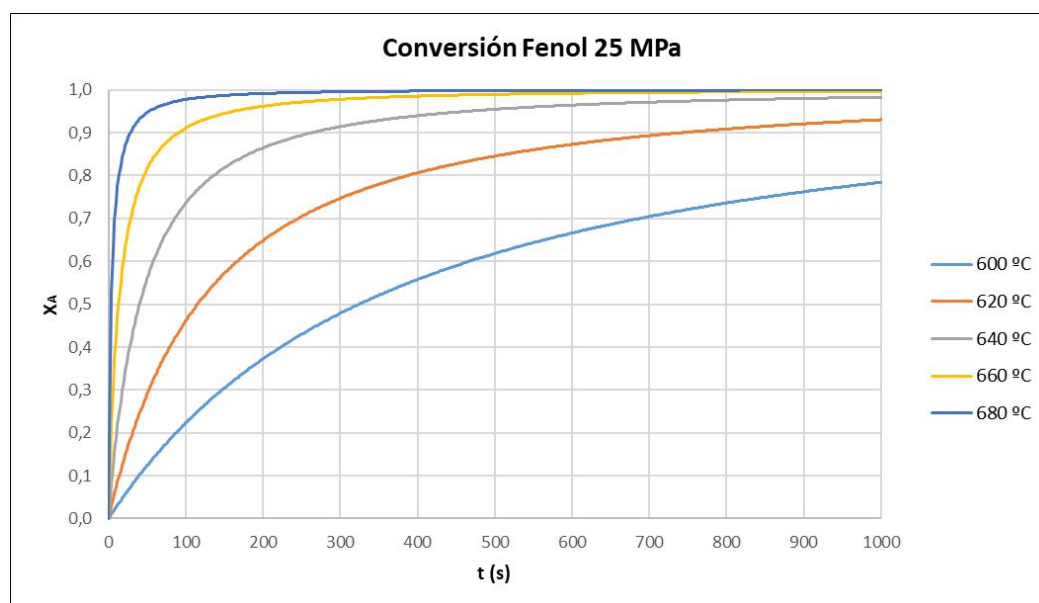
$$T_f = 640 + \frac{(525 \cdot 1000) \cdot 0,01 \cdot 0,98}{-1 \cdot 50,79 \cdot 2,834} = 604,26 \text{ °C}$$

Huelsman [3] y otros autores catalogan la GASC de fenol como una reacción ligeramente endotérmica, lo cual puede interpretarse como que el descenso de la temperatura es de unos 10 o 15 °C dada la pequeña concentración de fenol presente en la corriente de alimentación. Por tanto, el valor de entalpía obtenido mediante la simulación en Aspen Plus parece bastante alto, sobre todo teniendo en cuenta

que con la proporción de fenol existente se precisan de grandes cambios en la entalpía de reacción para afectar considerablemente a la temperatura de la corriente. En consecuencia, como es una reacción muy influenciada por la temperatura, el valor de entalpía obtenido mediante simulación no es aplicable al sistema en estudio, lo cual era previsible, ya que la ecuación simulada no contiene todos los productos observados experimentalmente.

Volviendo a la base de que la reacción global es ligeramente endotérmica, que el aislamiento no será perfecto y que el reactor es bastante largo, una suposición lógica es que se observe una diferencia de temperatura entre la alimentación y el efluente del reactor de unos 20 °C. Con esto, y, ante la falta de fuentes de información fiables, se estudiará trabajar con una alimentación entre 610 y 650 °C admitiendo que abandona el reactor a 20 °C menos. Por tanto, primero se fijará la temperatura de alimentación y, a partir de esta, la entalpía de reacción necesaria para que la corriente abandone el reactor a 20 °C menos.

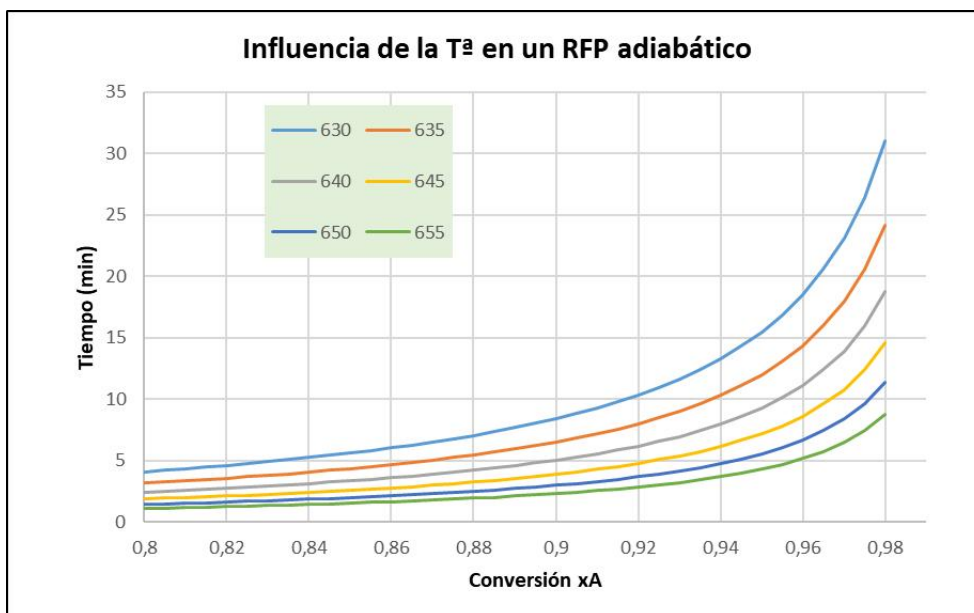
Para estudiar la influencia de la temperatura en la conversión para un tiempo de residencia dado, se ha resuelto el BM al RFP isoterma para distintas temperaturas, generando la Figura A30:



*Figura A30: Conversión de fenol en un reactor isoterma en función de la temperatura para una alimentación 0,2 M de fenol y 25 MPa*

Pese a que se busca que el reactor trabaje a la menor temperatura posible, la reacción es demasiado lenta, por lo que se vuelve inviable una alimentación entre 600 y 620 °C. También puede apreciarse que si el reactor trabajase isotérmicamente, una alimentación a 640 °C podría ser una solución válida, sin embargo, sería necesario estudiar este valor en un reactor adiabático. Para ello, se resuelven de forma conjunta BM y BE del sistema y, además, para que la comparación tenga sentido, el efluente del reactor debe encontrarse a 20 °C menos que la alimentación. Para lograrlo se ha usado la función

“Buscar objetivo” en Excel para obtener el valor de  $\Delta H$  que implique una diferencia entre la entrada y salida del reactor de 20 °C para cada temperatura estudiada. A continuación, se muestra la gráfica resultante de la resolución conjunta de ambos balances para distintas temperaturas de alimentación (Fig. A31) y la tabla A6 donde se recogen los resultados finales:



*Figura A31: Influencia de la temperatura de alimentación un RFP adiabático*

En la figura anterior se puede observar como la velocidad de reacción se reduce mucho a medida que transcurre la reacción, en parte por la disminución de la temperatura, pero sobre todo por la concentración de fenol, ya que el tiempo de reacción para obtener un 94% de conversión es menos de la mitad que para un 98%. Las curvas se vuelven totalmente exponenciales a medida que se agota la concentración de fenol y, por eso, la conversión buscada es del 98% y no mayor. Es evidente también que hay una gran diferencia en cuanto al tiempo de reacción necesario para alcanzar la conversión requerida para distintas temperaturas, aunque el incremento de esta sea de tan solo 5 °C.

*Tabla A6: Resultados de la influencia de la temperatura en el tiempo de reacción de un RFP adiabático con un caudal de 400 L/h*

$T^a$ inicial (°C)	$\Delta H$ (kJ/mol)	$\tau$ (min)	Volumen reactor (L)	$\Delta\tau/\Delta T$ (min/°C)
630	300,2	30,82	3240	-
635	298,6	23,99	2522	1,366
640	297,2	18,67	1963	1,064
645	295,6	14,51	1525	0,832
650	294,6	11,27	1185	0,648
655	293,6	8,78	923	0,498

Como se mencionó anteriormente, se han calculado los valores de  $\Delta H$  que implican una diferencia de 20 °C entre la entrada y la salida del reactor para distintas temperaturas de alimentación utilizando la función “Buscar objetivo” de Excel. En la última columna de la anterior Tabla A6 se observa que con cada aumento de temperatura se reduce la ganancia, es decir, cada incremento de temperatura produce una disminución del tiempo de residencia menor que la que provocaba el incremento de temperatura anterior. Sin embargo, la disminución del tiempo de reacción necesario sigue siendo considerable y más aún si se tienen en cuenta las características del reactor. Como se fijó en las especificaciones de diseño un diámetro nominal máximo del reactor de 60,32 mm, el diámetro interno del reactor será bastante pequeño, de forma que un aumento de cientos de litros en dicho reactor puede volverlo totalmente inviable debido a su excesiva longitud.

Por esta razón, la temperatura de la alimentación del reactor será de 650 °C, ya que esta se fijó como la temperatura más alta permisible para su funcionamiento en las especificaciones de diseño, con el fin de evitar desgaste térmico en los materiales y costes energéticos desorbitados. Además, de esta forma queda definida la entalpía de reacción supuesta como 294,6 kJ/mol para garantizar la disminución de 20 °C de la temperatura de la alimentación.

### **3.4 RESULTADO DE LOS BALANCES**

En el siguiente apartado, se expondrán los resultados obtenidos en la simulación del reactor realizada en una hoja de cálculo Excel mediante la resolución conjunta de los balances de materia y de energía, siguiendo la cinética propuesta por Huelsman y Savage [3].

Se comenzará explicando, de manera ejemplificada, los cálculos que hay que realizar previa resolución de los balances mencionados. La única variable que aún no está definida es el caudal de operación, pero, como el cálculo de la conversión se realizará en función del tiempo espacial, esto no es problema.

En los anexos anteriores se han realizado ejemplificaciones con dos caudales diferentes, sin embargo, se obtuvo que un caudal de 400 L/h precisa de un reactor demasiado grande, por lo que, aunque este no influya en el resultado, se realizará el cálculo con un caudal de fenol de 0,01 mol/s. Debido a que el fenol se encuentra en una proporción bastante pequeña con respecto al agua y la dificultad de estimar las propiedades del mismo en las condiciones de reacción, se considerarán las propiedades del agua para la corriente completa mientras esta se encuentre en el interior del reactor. Evidentemente, sí se considerará la influencia del fenol en el caudal másico, pero, como el  $\Delta H_r$  está calculado en función de las propiedades de la corriente de entrada, considerar el  $C_p$  del fenol (calculado de forma aproximada en el Anexo 1) cambiará el valor del  $\Delta H_r$  pero no la solución del cálculo. La reacción se lleva a cabo con una alimentación 0,2 M de fenol a 650 °C y 25 MPa.

El caudal másico, necesario para la resolución del balance de energía, es el siguiente:



$$m_T = F_{A_0} \cdot mM(C_6H_5OH) + Q \cdot \rho_{molar H_2O} \cdot mM(H_2O)$$

$$m_T = 0,01 \left( \frac{mol}{s} \right) \cdot 94,11 \left( \frac{g}{mol} \right) + 0,05 \left( \frac{L}{s} \right) \cdot 55,55 \left( \frac{mol}{L} \right) \cdot 18 \left( \frac{g}{mol} \right) = 50,94 \text{ g/s}$$

La expresión resultante del BE es la siguiente (ecuación 7):

$$T_f = T_0 + \frac{(-\Delta H_r)F_{A_0}(x_A - x_{A_0})}{-v_A \cdot m_T \cdot \bar{c}_p} \quad (7)$$

El término  $-v_A$  se encuentra incluido en el  $\Delta H_r$  calculado previamente, de forma que:

$$\frac{(-\Delta H_r)}{-v_A} = -294,6 \left( \frac{kJ}{mol} \right)$$

Se precisa de la resolución conjunta de BM y BE, por lo que se atenderá, a continuación, a la expresión resultante del primero (ecuación 3):

$$\frac{\tau}{C_{A_0}} = \int_{x_{A_0}}^{x_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} \quad (3)$$

Siendo:

$$(-r_A) = -\frac{d[C_6H_5OH]}{dt} = k_1(T)[C_6H_5OH]^a[H_2O]^b + k_2(T)[C_6H_5OH]^c[H_2O]^d$$

La resolución conjunta de los balances de materia y energía se basa en el cálculo de la temperatura resultante para un incremento de conversión y, a partir de la misma, las constantes y velocidad de reacción una vez transcurrido dicho incremento de conversión. De esta forma, completando esta secuencia para todos los incrementos de conversión hasta llegar a 0,98, será posible resolver la integral de la ecuación 3 numéricamente. Es importante remarcar que existen variables que dependen de la temperatura, por lo que también deben ser calculadas a la temperatura correspondiente a cada valor de conversión, este es el caso de la concentración molar del agua (densidad) y su calor específico.

En la Tabla A7 se muestran los valores iniciales necesarios para la resolución de las ecuaciones anteriores:

*Tabla A7: Valores iniciales para la resolución de BM y BE*

<b>Datos iniciales del reactor</b>		
Variable	Simbología	Valor
Temperatura inicial (°C)	$T_0$	650
Entalpía molar de reacción (kJ/mol)	$\Delta H_r$	294,6
Concentración inicial de fenol (M)	$[C_6H_5OH]_0$	0,2
Caudal másico (g/s)	$m_T$	50,94
Caudal molar de fenol (mol/s)	$F_{A0}$	0,01
Factor preexponencial 1 (M/s)*	$K_{01}$	1,92E+15
Factor preexponencial 2 (M/s)*	$K_{02}$	4,42E+11
Energía de activación 1 (kJ/mol)	$E_{a1}$	125
Energía de activación 2 (kJ/mol)	$E_{a2}$	280
Orden parcial $C_6H_5OH$ (1)	$a$	1,73
Orden parcial $H_2O$ (1)	$b$	-16,6
Orden parcial $C_6H_5OH$ (2)	$c$	0,92
Orden parcial $H_2O$ (2)	$d$	1,39

\*Las unidades de los factores preexponenciales son  $M^{-(a+b-1)}/s$  y  $M^{-(c+d-1)}/s$  respectivamente.

A continuación, se ejemplificará el cálculo para el primer incremento de conversión,  $dx_A$ , que será idéntico al cálculo del resto de incrementos, con la salvedad de que el caudal de entrada de cada incremento, es el de salida del anterior y lo mismo ocurre con la concentración.

Para poder resolver la integral anterior se necesita calcular la velocidad de desaparición de fenol para cada incremento de conversión, la cual se presenta en la siguiente expresión (ecuación 8):

$$(-r_A) = 1,9 \cdot 10^{15} \cdot e^{\frac{125000}{8,31 \cdot T}} \cdot [C_6H_5OH]^{1,73} [H_2O]^{-16,6} + 4,4 \cdot 10^{11} \cdot e^{\frac{280000}{8,31 \cdot T}} \cdot [C_6H_5OH]^{0,92} [H_2O]^{1,39} \quad (8)$$

El agua se encuentra en una proporción mucho mayor que el fenol por lo que podría considerarse que no se consume con el transcurso de la reacción, sin embargo, no puede considerarse constante su concentración, ya que varía de forma apreciable con la temperatura del medio. Además, Huelsman y Savage [3] fijaron los parámetros de su cinética para la GASC de fenol considerando constante la concentración del agua, puesto que la fijaron a partir de la presión de operación. Esto quiere decir que la cinética seleccionada no está preparada para trabajar con disminución de la concentración del agua debido al consumo de la misma. La variación de la concentración del agua se deberá, por tanto, exclusivamente al cambio de las propiedades de la misma por las condiciones del entorno. Asimismo, Huelsman y Savage [3] expresaron la ecuación cinética en cuestión, en función de la concentración de fenol en condiciones ambientales, es decir, la concentración inicial de fenol es de 0,2 M.

Dado el caso para  $x_A=0$ :

$$(-r_A) = 1,9 \cdot 10^{15} \cdot e^{\frac{125000}{8,31 \cdot 923,15}} \cdot 0,2^{1,73} \cdot 3,552^{-16,6} + 4,4 \cdot 10^{11} \cdot e^{\frac{280000}{8,31 \cdot 923,15}} \cdot 0,1^{0,92} \cdot 3,552^{1,39}$$

$$(-r_A) = 0,0073 \frac{\text{mol}}{\text{L}\cdot\text{s}} ; \frac{1}{(-r_A)} = 136,79 \frac{\text{L}\cdot\text{s}}{\text{mol}}$$

El siguiente paso es el cálculo de la temperatura de la corriente tras el primer incremento de conversión. Cuanto más incrementos se realicen, es decir, menor sea el avance con cada incremento, más preciso será el cálculo del área bajo la curva de la función de la ecuación 3. En el simulador de la hoja de cálculo de Excel se ha trabajado con incrementos de 0,005. El cálculo de la temperatura tras el primer incremento de conversión se muestra a continuación:

$$T_f = 650 + \frac{-294,6 \cdot 0,01 \cdot (0,005 - 0)}{50,94 \cdot 2,814} = 649,90 \text{ } ^\circ\text{C}$$

En este punto, la temperatura sería ligeramente inferior a la del inicio, lo mismo ocurriría con la concentración de fenol que se ajusta para el siguiente incremento mediante la ecuación 9:

$$[\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}] = [\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}]_0 \cdot (1 - x_A) \tag{9}$$

Aplicando el caso actual a la ecuación anterior:

$$[\text{C}_6\text{H}_5\text{OH}] = 0,2 \text{ M} \cdot (1 - 0,005) = 0,199 \text{ M}$$

El caudal másico es una propiedad que no se verá modificada en el transcurso de la reacción. Si bien es cierto que desaparecen gramos de fenol, estos se transforman en productos intermedios y, finalmente, en los productos gaseosos, es decir, el caudal másico es constante. Una vez conocidas la temperatura y concentración de fenol tras un incremento de conversión, se calcula la velocidad de reacción para las nuevas condiciones y se repite el proceso.

Es importante realizar el cálculo con el Cp y la densidad molar del agua para cada valor de temperatura. Una vez que se complete todo el rango de conversión requerida, se procederá al cálculo del área bajo la curva mediante métodos numéricos como pueden ser el trapezoidal o el de Simpson. Mediante el empleo de métodos numéricos se obtiene una solución aproximada de la ecuación 3, en la que se aproxima dicha integral a un sumatorio tal y como se muestra a continuación:

$$\frac{\tau}{C_{A0}} = \int_{X_{A0}}^{x_{Af}} \frac{dX_A}{(-r_A)} \approx \sum_{X_{A0}=0}^{x_{Af}=0,98} \frac{1}{(-r_A)} \cdot \Delta X_A$$

La regla de Simpson es un método más preciso que el trapezoidal, pero más difícil de implementar en una hoja Excel, además, se precisa de un número impar de datos. Por estas razones, se utilizará el

método de Simpson para calcular el tiempo necesario para la reacción completa ( $x_A=0,98$ ) y, para el estudio de la evolución de la temperatura, o conversión, con el volumen del reactor, el método trapezoidal.

El método de Simpson se emplearía con la siguiente expresión (ecuación 10):

$$\int_{X_{Ao}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{(-r_A)} = \frac{0,005}{3} \left[ \left( \frac{1}{(-r_A)_1} \right) + \left( \frac{1}{(-r_A)_n} \right) + 4 \left[ \sum_{j=2,4,6\dots}^{n-1} \left( \frac{1}{(-r_A)_j} \right) \right] + 2 \left[ \sum_{j=3,5,7\dots}^{n-2} \left( \frac{1}{(-r_A)_j} \right) \right] \right] \quad (10)$$

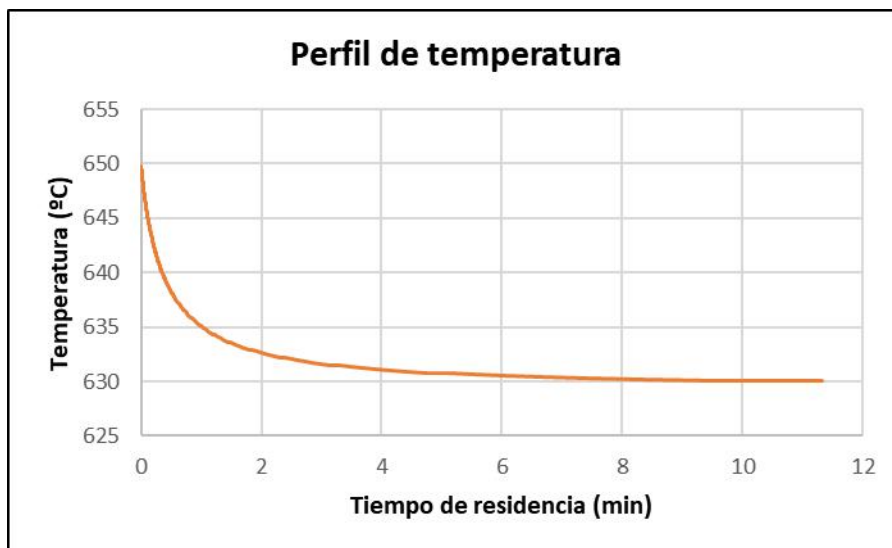
A continuación, se muestra la Tabla A8, donde se encuentran recogidos los resultados de la resolución de ambos balances de forma conjunta siguiendo los pasos anteriormente detallados:

*Tabla A8: Resultado resolución conjunta BM y BE del reactor*

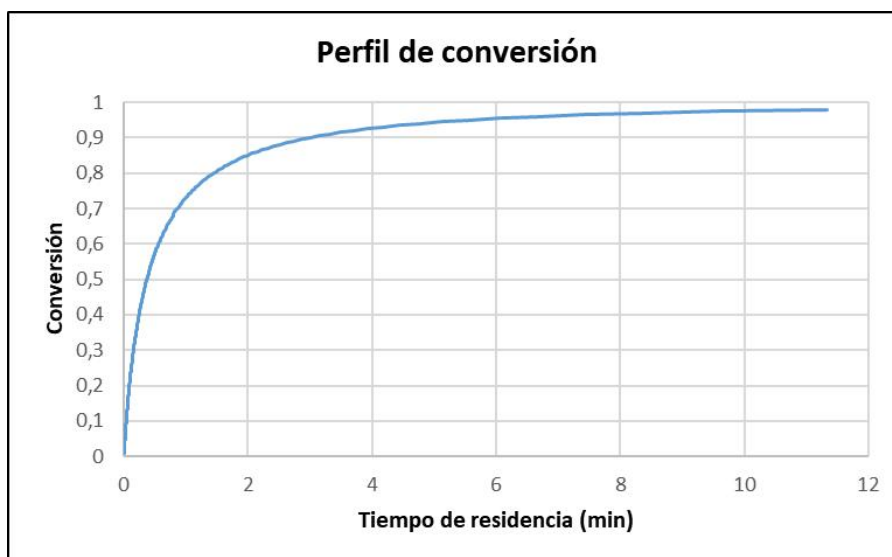
<b>Resultados finales del reactor</b>		
Variable	Simbología	Valor
Temperatura inicial (°C)	$T_0$	650
Temperatura final (°C)	$T_f$	630
Concentración fenol salida (M)	$[C_6H_5OH]$	0,0004
Conversión obtenida	$x_A$	0,98
Tiempo espacial del reactor (min)	$\tau$	11,27

En la anterior Tabla A8 no se menciona el volumen del reactor, ya que, como se ha mencionado anteriormente, el caudal del mismo, con el objetivo de que sea el óptimo, no está fijado aún. De esta forma, el caudal no será seleccionado hasta realizar el estudio de los diámetros y espesores comerciales adecuados para el sistema. La concentración de fenol en la salida de la anterior Tabla A8 se encuentra referido al caudal en condiciones ambientales.

A continuación, se muestra una representación del perfil de temperatura (Figura A32) y de conversión (Figura A33) en función del tiempo de residencia en el reactor, característica análoga a la longitud del reactor al tratarse el mismo de un RFP:



*Figura A32: Perfil de temperatura en el reactor diseñado*



*Figura A33: Perfil de conversión en el reactor diseñado*

De las anteriores figuras A32 y A33 es interesante observar como la gran mayoría de la reacción transcurre en menos de dos minutos y luego la velocidad de la misma se reduce muchísimo. Esto evidencia la gran influencia que presentan la concentración de fenol y la temperatura sobre la cinética del proceso de GASC de fenol.

El tiempo de reacción necesario para cada incremento de conversión se ha calculado mediante el método trapezoidal para resolver el área bajo la curva de la ecuación 3. Es un método que sí puede implementarse en Excel para todos los valores de una columna y para el simulador diseñado presenta la estructura de la ecuación 11:

*Diseño de un reactor para la gasificación en agua supercrítica de subproductos del reciclado de fibras de carbono de la industria aeronáutica*

$$\int_{X_{Ao}}^{X_{Af}} \frac{dX_A}{(-r_A)} = \frac{0,005}{2} \left[ \left( \frac{1}{-r_A} \right)_1 + \left( \frac{1}{-r_A} \right)_n + 2 \left[ \sum_{j=2,3,4...}^{n-1} \left( \frac{1}{-r_A} \right)_j \right] \right] \quad (11)$$

A continuación, se mostrará mediante capturas de pantalla la hoja de cálculo de Excel en la que se ha construido el simulador para la resolución conjunta de los balances de materia y energía del reactor para el caudal de operación y diámetro del reactor que se fijarán en el Anexo 4. Diseño del reactor:

Alimentación		Resultados	
C6H5OH (M)	0,2	Tª salida (°C)	630
FAO (mol fenol/s)	0,0085	Conversión final	0,98
Tª (°C)	650	τ/Cao Simpson	3380,6
ΔH (kJ/mol)	294,6	τ simpson (min)	11,27
Caudal (L/h)	153	V reactor (L)	457,88
Mmol fenol (g/mol)	94,11	Diámetro int (m)	0,038
Q másico fenol (g/s)	0,800	Reynolds	40167
Q másico (g/s)	43,30	Longitud (m)	399,93
		L/D	10475
		V lineal (m/s)	0,592

Caudal de productos (g/s)					
H2O	C6H5OH	H2	CH4	CO	CO2
41,645	0,016	0,044	0,282	0,258	1,019

Caracterización cinética			
Mecanismo de reacción 1		Mecanismo de reacción 2	
Energía de activación (kJ/mol)	125	Energía de activación (kJ/mol)	280
Factor preexponencial	1,92E+15	Factor preexponencial	4,42E+11
Orden parcial fenol	1,73	Orden parcial fenol	0,92
Orden parcial agua	-16,6	Orden parcial agua	1,39

xA	Tª (°C)	Cp (kJ/kg·Cº)	Agua (M)	k (1) (1/s)	k (2) (1/s)	k1' agua=cte	k2' agua=cte	1/-rA (s·l/mol)	τ (min)	Volumen (L)
0	650,00	2,814	3,552	1,61E+08	6,19E-05	0,117	3,60E-04	136,79	-	-
0,005	649,90	2,814	3,553	1,60E+08	6,16E-05	0,116	3,59E-04	138,72	-	-
0,01	649,79	2,814	3,553	1,60E+08	6,14E-05	0,116	3,57E-04	140,69	0,004	0,17
0,015	649,69	2,815	3,554	1,60E+08	6,11E-05	0,115	3,56E-04	142,69	0,005	0,26
0,02	649,59	2,815	3,555	1,59E+08	6,09E-05	0,115	3,55E-04	144,72	0,007	0,34
0,025	649,49	2,815	3,556	1,59E+08	6,06E-05	0,114	3,53E-04	146,79	0,009	0,43
0,03	649,38	2,815	3,556	1,59E+08	6,04E-05	0,113	3,52E-04	148,89	0,011	0,52
0,035	649,28	2,815	3,557	1,59E+08	6,01E-05	0,113	3,51E-04	151,04	0,013	0,61
0,04	649,18	2,816	3,558	1,58E+08	5,99E-05	0,112	3,49E-04	153,22	0,015	0,70
0,045	649,08	2,816	3,559	1,58E+08	5,96E-05	0,111	3,48E-04	155,44	0,017	0,79
0,05	648,97	2,816	3,559	1,58E+08	5,94E-05	0,111	3,47E-04	157,69	0,019	0,89
0,055	648,87	2,816	3,560	1,57E+08	5,92E-05	0,110	3,46E-04	159,99	0,021	0,98
0,06	648,77	2,816	3,561	1,57E+08	5,89E-05	0,110	3,44E-04	162,33	0,023	1,08
0,065	648,66	2,816	3,562	1,57E+08	5,87E-05	0,109	3,43E-04	164,71	0,025	1,17
0,07	648,56	2,817	3,563	1,57E+08	5,84E-05	0,108	3,42E-04	167,14	0,027	1,27
0,075	648,46	2,817	3,563	1,56E+08	5,82E-05	0,108	3,40E-04	169,60	0,029	1,37
0,08	648,36	2,817	3,564	1,56E+08	5,80E-05	0,107	3,39E-04	172,12	0,031	1,47
0,085	648,25	2,817	3,565	1,56E+08	5,77E-05	0,107	3,38E-04	174,68	0,033	1,57
0,09	648,15	2,817	3,566	1,55E+08	5,75E-05	0,106	3,37E-04	177,28	0,035	1,68
0,095	648,05	2,818	3,566	1,55E+08	5,73E-05	0,106	3,35E-04	179,94	0,037	1,78
0,1	647,95	2,818	3,567	1,55E+08	5,70E-05	0,105	3,34E-04	182,64	0,039	1,89
0,105	647,84	2,818	3,568	1,55E+08	5,68E-05	0,104	3,33E-04	185,39	0,042	1,99
0,11	647,74	2,818	3,569	1,54E+08	5,66E-05	0,104	3,31E-04	188,20	0,044	2,10
0,115	647,64	2,818	3,569	1,54E+08	5,63E-05	0,103	3,30E-04	191,05	0,046	2,21
0,12	647,54	2,819	3,570	1,54E+08	5,61E-05	0,103	3,29E-04	193,97	0,049	2,32
0,125	647,43	2,819	3,571	1,53E+08	5,59E-05	0,102	3,28E-04	196,93	0,051	2,43
0,13	647,33	2,819	3,572	1,53E+08	5,56E-05	0,102	3,27E-04	199,95	0,053	2,55
0,135	647,23	2,819	3,573	1,53E+08	5,54E-05	0,101	3,25E-04	203,03	0,056	2,66
0,14	647,13	2,819	3,573	1,53E+08	5,52E-05	0,101	3,24E-04	206,17	0,058	2,78
0,145	647,02	2,819	3,574	1,52E+08	5,50E-05	0,100	3,23E-04	209,37	0,061	2,90
0,15	646,92	2,820	3,575	1,52E+08	5,47E-05	0,100	3,22E-04	212,63	0,063	3,01
0,155	646,82	2,820	3,576	1,52E+08	5,45E-05	0,099	3,20E-04	215,96	0,066	3,14
0,16	646,71	2,820	3,576	1,51E+08	5,43E-05	0,098	3,19E-04	219,35	0,068	3,26
0,165	646,61	2,820	3,577	1,51E+08	5,41E-05	0,098	3,18E-04	222,80	0,071	3,38
0,17	646,51	2,820	3,578	1,51E+08	5,39E-05	0,097	3,17E-04	226,33	0,073	3,51
0,175	646,41	2,821	3,579	1,51E+08	5,36E-05	0,097	3,16E-04	229,92	0,076	3,64
0,18	646,30	2,821	3,579	1,50E+08	5,34E-05	0,096	3,14E-04	233,59	0,079	3,76
0,185	646,20	2,821	3,580	1,50E+08	5,32E-05	0,096	3,13E-04	237,33	0,081	3,89
0,19	646,10	2,821	3,581	1,50E+08	5,30E-05	0,095	3,12E-04	241,14	0,084	4,03

Continúa de la misma forma...

*Diseño de un reactor para la gasificación en agua supercrítica de subproductos del reciclado de fibras de carbono de la industria aeronáutica*

xA	Tª (°C)	Cp (kJ/kg·Cº)	Agua (M)	k (1) (1/s)	k (2) (1/s)	k1' agua=cte	k2' agua=cte	1/-rA (s-l/mol)	τ (min)	Volumen (L)
0,8	633,65	2,849	3,674	1,20E+08	3,20E-05	0,050	1,95E-04	5010,4	1,45	69,23
0,805	633,55	2,849	3,675	1,19E+08	3,19E-05	0,049	1,95E-04	5256,6	1,49	71,30
0,81	633,45	2,849	3,676	1,19E+08	3,18E-05	0,049	1,94E-04	5520,9	1,54	73,46
0,815	633,35	2,850	3,677	1,19E+08	3,16E-05	0,049	1,93E-04	5805,1	1,58	75,73
0,82	633,25	2,850	3,677	1,19E+08	3,15E-05	0,049	1,92E-04	6111,4	1,63	78,11
0,825	633,14	2,850	3,678	1,19E+08	3,14E-05	0,048	1,92E-04	6441,9	1,69	80,61
0,83	633,04	2,850	3,679	1,18E+08	3,12E-05	0,048	1,91E-04	6799,5	1,74	83,25
0,835	632,94	2,851	3,680	1,18E+08	3,11E-05	0,048	1,90E-04	7187,0	1,80	86,03
0,84	632,84	2,851	3,680	1,18E+08	3,10E-05	0,048	1,90E-04	7608,2	1,86	88,95
0,845	632,74	2,851	3,681	1,18E+08	3,08E-05	0,047	1,89E-04	8066,9	1,93	92,05
0,85	632,64	2,851	3,682	1,17E+08	3,07E-05	0,047	1,88E-04	8567,9	1,99	95,33
0,855	632,54	2,852	3,683	1,17E+08	3,06E-05	0,047	1,87E-04	9116,5	2,07	98,81
0,86	632,43	2,852	3,683	1,17E+08	3,05E-05	0,047	1,87E-04	9719,1	2,14	102,50
0,865	632,33	2,852	3,684	1,17E+08	3,03E-05	0,046	1,86E-04	10383	2,23	106,44
0,87	632,23	2,852	3,685	1,17E+08	3,02E-05	0,046	1,85E-04	11117	2,31	110,64
0,875	632,13	2,853	3,686	1,16E+08	3,01E-05	0,046	1,84E-04	11932	2,41	115,13
0,88	632,03	2,853	3,687	1,16E+08	3,00E-05	0,046	1,84E-04	12840	2,51	119,95
0,885	631,93	2,853	3,687	1,16E+08	2,98E-05	0,045	1,83E-04	13855	2,62	125,13
0,89	631,83	2,853	3,688	1,16E+08	2,97E-05	0,045	1,82E-04	14997	2,73	130,72
0,895	631,72	2,854	3,689	1,16E+08	2,96E-05	0,045	1,82E-04	16287	2,86	136,77
0,9	631,62	2,854	3,690	1,15E+08	2,95E-05	0,045	1,81E-04	17753	3,00	143,34
0,905	631,52	2,854	3,690	1,15E+08	2,93E-05	0,044	1,80E-04	19428	3,15	150,50
0,91	631,42	2,854	3,691	1,15E+08	2,92E-05	0,044	1,79E-04	21356	3,31	158,34
0,915	631,32	2,855	3,692	1,15E+08	2,91E-05	0,044	1,79E-04	23590	3,49	166,96
0,92	631,22	2,855	3,693	1,14E+08	2,90E-05	0,044	1,78E-04	26203	3,69	176,50
0,925	631,12	2,855	3,693	1,14E+08	2,89E-05	0,044	1,77E-04	29285	3,91	187,11
0,93	631,02	2,856	3,694	1,14E+08	2,87E-05	0,043	1,77E-04	32961	4,16	198,99
0,935	630,91	2,856	3,695	1,14E+08	2,86E-05	0,043	1,76E-04	37396	4,44	212,41
0,94	630,81	2,856	3,696	1,14E+08	2,85E-05	0,043	1,75E-04	42822	4,76	227,68
0,945	630,71	2,856	3,696	1,13E+08	2,84E-05	0,043	1,75E-04	49567	5,13	245,26
0,95	630,61	2,857	3,697	1,13E+08	2,83E-05	0,042	1,74E-04	58113	5,56	265,73
0,955	630,51	2,857	3,698	1,13E+08	2,81E-05	0,042	1,73E-04	69185	6,06	289,92
0,96	630,41	2,857	3,699	1,13E+08	2,80E-05	0,042	1,73E-04	83928	6,67	319,01
0,965	630,31	2,857	3,699	1,13E+08	2,79E-05	0,042	1,72E-04	104239	7,42	354,78
0,97	630,21	2,858	3,700	1,12E+08	2,78E-05	0,041	1,71E-04	133464	8,37	400,02
0,975	630,10	2,858	3,701	1,12E+08	2,77E-05	0,041	1,71E-04	178013	9,61	459,43
0,98	630,00	2,858	3,702	1,12E+08	2,76E-05	0,041	1,70E-04	251603	11,33	541,69

## **4. DISEÑO DEL REACTOR**

### **4.1 SELECCIÓN DEL MATERIAL**

La selección adecuada de los materiales de construcción para los equipos utilizados en cualquier proceso industrial es fundamental para garantizar que cumplan con las exigencias térmicas, mecánicas y químicas del proceso. Esto es especialmente importante en plantas que involucran fluidos supercríticos debido a las condiciones extremas de operación que presentan. La correcta selección de un material puede evitar la degradación y corrosión del reactor, lo que provocaría un menor rendimiento, aumento de los costes de mantenimiento e incluso riesgos para la seguridad del operador. El material debe ser capaz de soportar temperaturas y presiones extremadamente altas sin sufrir deformaciones y, además, debe ser resistente a la corrosión causada por el agua supercrítica y los intermediarios generados y consumidos durante la reacción de gasificación.

Las superaleaciones comerciales más empleadas para este tipo de procesos en condiciones extremas de presión y temperatura son aceros inoxidable de alta resistencia, como el acero inoxidable 316, y aleaciones con cromo y un alto porcentaje de níquel para evitar problemas de corrosión, como los aceros de la familia Inconel o el Hastelloy C-276.

#### ***Acero Inoxidable 316/316L***

El acero inoxidable AISI 316/316L se corresponde con acero inoxidable con elevadas cantidades de níquel y plomo en su composición química aleado con una cantidad de entre el 2 y 3%. Es uno de los aceros inoxidables austeníticos más utilizados y, debido a la adición de molibdeno, presenta una gran mejora a la corrosión y resistencia a altas temperaturas frente a otros aceros inoxidables.

El acero inoxidable 316L es la versión baja en carbono del acero inoxidable AISI 316. Por lo general, ambas aleaciones se consideran igualmente buenas, aunque al tener la 316L un porcentaje menor de C posee una mayor resistencia a la corrosión intergranular y un rendimiento y resistencia a la tracción algo inferiores al 316. Además, el mayor porcentaje en carbono del 316 lo hace más duradero y resistente al calor en comparación con el 316L. Ambos presentan una buena resistencia a la oxidación en condiciones de uso intermitente por debajo de 870 °C y en continuo hasta 930 °C, sin embargo, es recomendable no usar de forma continua el AISI 316 en el rango de 430-860 °C [10].

Como la GASC tiene lugar en el rango de temperaturas en las que el uso de este acero no se recomienda, este material queda descartado, razón por la cual no se presentan sus características más importantes.

#### ***Hastelloy C-276***



Hastelloy C-276 es una superaleación que cuenta con un contenido en níquel superior al 50%, además de molibdeno y cromo con adición de tungsteno que ofrece una excelente resistencia a la corrosión en una amplia variedad de ambientes hostiles. Su alto contenido de níquel y molibdeno le confiere una alta resistencia a la corrosión en ambientes reductores, mientras que el cromo lo hace resistente a medios oxidantes. Además, esta aleación es resistente a la formación de precipitados en el límite de grano en la zona afectada por el calor, lo que la hace adecuada para su uso en muchas aplicaciones químicas en condiciones de soldadura.

Aunque Hastelloy C-276 se usa principalmente para aplicaciones corrosivas, en lugar de aplicaciones estructurales, la aleación todavía cuenta con buenas propiedades mecánicas. La aleación C-276 es tan rígida y resistente como el acero martensítico y se puede utilizar a temperaturas relativamente altas. En la Tabla A9 se muestran las propiedades mecánicas más interesantes para la aplicación requerida del Hastelloy C-276 [11]:

*Tabla A9: Propiedades mecánicas Hastelloy C-276*

Propiedades mecánicas Hastelloy C-276	
Densidad (g/cm <sup>3</sup> )	8,89
Punto de fusión (°C)	1370
Límite elástico (MPa)	355
Resistencia a la tracción (MPa)	790
% de elongación	40

Las resistencias térmica y química del Hastelloy C-276 son más que correctas, lo siguiente es comparar sus propiedades mecánicas con las otras aleaciones que cumplan este primer requisito.

### ***Inconel***

Inconel es una familia de superaleaciones austeníticas a base de níquel-cromo. Las aleaciones de Inconel, debido a su alto contenido de níquel, son resistentes a la oxidación y la corrosión y son adecuadas para su uso en ambientes extremos sometidos a presión y calor. Inconel se utiliza comúnmente en aplicaciones que requieren resistencia a altas temperaturas y corrosión, como en motores de aviones, turbinas de gas, intercambiadores de calor y componentes de reactores nucleares. También se utiliza en la industria química y petroquímica debido a su resistencia a ambientes corrosivos [12].

Las 3 principales aleaciones de la familia de Inconel son 600, 601 y 625, se atenderá por separado a las propiedades de cada una:

**-Inconel 600:** Esta aleación puede emplearse en un amplio rango de temperaturas, desde temperaturas criogénicas hasta superiores a 1093 °C. Destaca por ser altamente resistente al agrietamiento por corrosión bajo tensión causado por iones cloruro y por su excelente resistencia a soluciones alcalinas. Entre sus aplicaciones se encuentran las industrias química y nuclear.

**-Inconel 601:** Esta aleación de acero de níquel es reconocida por su resistencia a la oxidación en altas temperaturas, siendo muy resistente a la oxidación hasta 1200 °C. Tiene buena resistencia a la corrosión acuosa y alta fuerza mecánica, sin embargo, no se recomienda su uso en ambientes de alta reducción, por lo que, al tratarse la GASC de un proceso reductor, queda descartado su uso.

**-Inconel 625:** Inconel 625 es una aleación de níquel excepcionalmente resistente a la corrosión y a la oxidación. Su alta resistencia y excelente resistencia a la corrosión acuosa se deben a la adición de niobio, que actúa junto con el molibdeno para endurecer la matriz de la aleación. Esta aleación de níquel tiene una impresionante resistencia a la fatiga y a la fractura por corrosión bajo tensión causada por iones de cloruro.

En la tabla A10 se muestran las propiedades mecánicas de las aleaciones de Inconel 600 y 625 [13,14]:

*Tabla A10: Propiedades mecánicas Inconel 600 y 625, Special Metals*

Propiedades mecánicas Inconel	600	625
Densidad (g/cm <sup>3</sup> )	8,47	8,44
Punto de fusión (°C)	1354	1290
Límite elástico (MPa)	170	483
Resistencia a la tracción (MPa)	550	827
% de elongación	35	30

Al comparar las propiedades mecánicas de las aleaciones Inconel 625, Inconel 600 y Hastelloy C-276 mostradas en las anteriores Tablas A9 y A10, resulta evidente que las del Inconel 600 son bastantes inferiores. Además, puede verse que las del 625 son mejores que las de Hastelloy, pero queda determinar si esta diferencia es suficiente para seleccionar la primera de estas como el material del reactor.

Puesto que ambas aleaciones soportan las condiciones de reacción, se atenderá a la tensión máxima permisible por el material a la temperatura de operación, es decir, a 650 °C o, lo que es lo mismo, 1200 °F. La tensión máxima admisible a distintas temperaturas se encuentran en el apéndice A de la norma ASME B31.3 (2018) [15], en concreto en la tabla A-1 de tensión permisible para distintas aleaciones y configuraciones. Se debe buscar la parte específica de tubos y tuberías de aleaciones de níquel, siendo el código N06625, el correspondiente al Inconel 625.

A continuación se expone la tabla mencionada (Tabla A11):

*Tabla A11: Tensión máxima admisible respecto de la temperatura para el Inconel 625*

ASME B31.3-2018

**Table A-1 Basic Allowable Stresses in Tension for Metals (Cont'd)**  
 Numbers in Parentheses Refer to Notes for Appendix A Tables; Specifications Are ASTM Unless Otherwise Indicated

---

Basic Allowable Stress, S, ksi, at Metal Temperature, °F [Note (1)]

650	700	750	800	850	900	950	1,000	1,050	1,100	1,150	1,200	1,250	1,300	1,350	1,400	1,450	1,500	1,550	1,600	1,650	UNS No. or Grade	Spec. No.
<b>Nickel and Nickel Alloy — Pipes and Tubes (4a) (Cont'd)</b>																						
37.4	37.0	36.6	36.3	36.1	35.8	35.4	31.2	31.2	23.1	21.0	13.2	...	...	...	...	...	...	...	...	...	N06625	B444
37.4	37.0	36.6	36.3	36.1	35.8	35.4	31.2	31.2	23.1	21.0	13.2	...	...	...	...	...	...	...	...	...	N06625	B705

La tensión máxima permisible para un tubo de Inconel 625 a 1200 °F es de, por tanto, 13,2 ksi. En la misma tabla se encuentra también el valor correspondiente para aleaciones de Ni-Mo-Cr bajas en carbono, nombradas como N10276 [16], categoría en la que se encuentra el Hastelloy C-276. En la Tabla A12 se muestra la sección de la anterior tabla en la que aparecen las propiedades de este metal:

*Tabla A12: Tensión máxima admisible respecto de la temperatura para el Hastelloy C-276*

650	700	750	800	850	900	950	1,000	1,050	1,100	1,150	1,200	1,250	1,300	1,350	1,400	1,450	1,500	1,550	1,600	1,650	UNS No. or Grade	Spec. No.	
<b>Nickel and Nickel Alloy — Pipes and Tubes (4a)</b>																							
23.7	23.3	22.9	22.7	22.5	19.6	19.5	19.3	19.3	17.5	14.1	11.3	9.3	7.7	6.1	4.8	3.8	3.0	...	...	...	N06002	B619	
23.7	23.3	22.9	22.7	22.5	19.6	19.5	19.3	19.3	17.5	14.1	11.3	9.3	7.7	6.1	4.8	3.8	3.0	...	...	...	N06002	B622	
21.7	11.1	8.9	7.2	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	N08031	B619
21.7	11.1	8.9	7.2	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	N08031	B622
26.7	26.5	26.1	25.8	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	N06455	B622
24.6	24.0	23.5	23.1	22.8	22.6	22.4	22.3	18.5	15.0	12.2	9.8	7.8	...	...	...	...	...	...	...	...	N10276	B619	

La tensión máxima permisible para un tubo de Hastelloy C-276 a 1200 °F es de, por tanto, 9,8 ksi. La diferencia entre estos valores se traducirá en un mayor espesor necesario para el reactor si se construye en Hastelloy C-276. Teniendo en cuenta que el tiempo de residencia es superior a 30 minutos, la elección de este material puede significar un gran aumento en la longitud de dicho reactor, por lo que, a fin de minimizar el tamaño del mismo, se selecciona la aleación de Inconel 625 como material de construcción para, tanto el reactor, como los intercambiadores de calor previos.

## 4.2 SELECCIÓN DEL DIÁMETRO

Como queda definido en los objetivos del presente TFG, el reactor que se pretende diseñar se corresponde con un reactor flujo pistón. Los supuestos básicos de este modelo son que no se produce mezcla ni transferencia de calor en la dirección axial, además, no existe variación radial en la velocidad, la concentración o la temperatura. En otras palabras, el modelo RFP asume un sistema con

una mezcla perfecta en dirección radial y nula en dirección axial. Una forma de verificar que esta aproximación es válida (que la dispersión axial es despreciable) y que, por lo tanto, el comportamiento del sistema se asemeja al del reactor ideal de flujo pistón, es calcular el valor del número de Reynolds y que sea turbulento, ya que en este régimen el perfil de velocidades es bastante uniforme en la mayor parte de la sección transversal del reactor.

Para los flujos en conducciones circulares, el flujo es laminar si el número de Reynolds es menor que 2300 y turbulento si es mayor de 4000. La expresión para calcular dicho parámetro es la siguiente:

$$Re = \frac{\rho \cdot d \cdot v}{\mu}$$

Siendo:

$\rho$ : densidad del fluido, la del agua en las condiciones de reacción ( $\text{kg/m}^3$ )

$d$ : diámetro interno de la conducción (m)

$v$ : velocidad lineal (m/s)

$\mu$ : viscosidad dinámica, la del agua en las condiciones de reacción ( $\text{Pa} \cdot \text{s}$ )

La velocidad lineal se calcula, a partir del caudal y la sección de la conducción, de la siguiente forma:

$$v = \frac{Q}{S} = \frac{4 \cdot Q}{\pi \cdot d^2}$$

Realizando esta sustitución en la primera expresión se obtiene la ecuación 12:

$$Re = \frac{4 \cdot \rho \cdot Q}{d \cdot \mu \cdot \pi} \geq 4000 \quad (12)$$

En situaciones en las que el valor de  $Re$  sea igual o mayor a 4000, el régimen del flujo es turbulento y el sistema podría aproximarse a un RFP. Sin embargo, con el fin de que dicha aproximación sea lo más correcta posible, en el presente TFG solo se considerarán válidas aquellas soluciones que impliquen un valor de  $Re$ , al menos, un 150% mayor del valor mínimo. Dicho de otra forma, será necesario que el Reynolds sea superior a 10000.

La combinación entre el diámetro interno y el caudal de operación define el  $Re$ , que debe ser mayor a 10000 y el diámetro interno dependerá del diámetro externo y del espesor. Estas dos variables están normalizadas, por lo que se realizará una búsqueda de información sobre las dimensiones de tuberías comerciales hechas de Inconel 625 para, tras el cálculo del espesor requerido, verificar que el régimen es turbulento. Una vez que el diámetro interno quede definido, se calculará el caudal de operación para que la longitud del reactor sea de 400 metros. Evidentemente, debe comprobarse que la combinación de caudal y diámetro interno conlleva un régimen turbulento en el interior del reactor, de no ser así, sería necesario modificar dos de las tres variables en cuestión (diámetro interno, longitud del reactor y caudal de operación), manteniendo la otra constante hasta obtener un régimen de flujo turbulento.

### 4.3 CÁLCULO DEL ESPESOR

Para la selección de las tuberías correspondientes al reactor e intercambiador de calor previo se atenderá a la normativa en uso, a, donde se han detallado los cálculos a realizar y los requisitos que deben cumplir las tuberías a presión para que estén normalizadas. Como se indicó con anterioridad, la aleación elegida será Inconel 625, por lo que todos los cálculos y datos bibliográficos del presente anexo serán referentes a las propiedades de dicho material.

En la norma ASME B31.3 Process Piping se expone la siguiente ecuación (ecuación 13) como medio para determinar el espesor requerido para tramos rectos de tubo:

$$t_m = (t + c)M \quad (13)$$

Siendo:

$t_m$ : espesor de pared mínimo requerido, incluyendo tolerancias por corrosión y por erosión (mm)

$t$ : espesor de pared mínimo (mm)

$c$ : suma de las tolerancias mecánicas y tolerancias por corrosión y erosión (mm)

$M$ : tolerancia de fabricación, la mayoría de las especificaciones ASTM precisan de una tolerancia del 12,5%;  $M=1,125$

A su vez, la expresión obtenida en la norma ASME B31.3 Process Piping para el cálculo del espesor de pared mínimo para tubos rectos sometidos a presión interna:

$$t = \frac{PD}{2(SEW + PY)} \quad (14)$$

Siendo:

$P$ : presión interna de diseño (MPa)

$D$ : diámetro externo del tubo (mm)

$S$ : tensión máxima permisible a la temperatura de operación (MPa)

$E$ : eficiencia de junta, es producto de los factores de calidad de uniones, fundiciones y del grado estructural

$W$ : factor de reducción de la resistencia de la junta de soldadura

$Y$ : coeficiente de redistribución de esfuerzos perimetrales, depende del material y de la temperatura

La presión de diseño para el cálculo del espesor del tubo se aumentará un 12,5% como criterio de seguridad. De esta forma se asegura que el equipo aguanta la presión de operación (25 MPa), así como un aumento repentino de ella por un error de operación. Por lo que  $P_d=1,25 \cdot P=1,125 \cdot 25=28,125$  MPa. Quizás un 12,5% no parece un valor muy alto, pero un aumento de la presión de más de 30 bar es algo bastante improbable.

La tensión máxima admisible a distintas temperaturas, ya mostrada en el Anexo 4.1 “Selección del material”, se encuentra en el apéndice A de la norma ASME B31.3 (2018), en concreto en la tabla A-1 de tensión permisible para distintas aleaciones y configuraciones. Como ya se indicó anteriormente, se debe buscar la parte específica de tubos y tuberías de aleaciones de níquel, siendo el código N06625, el correspondiente al Inconel 625.

A continuación, con el fin de añadir coherencia a lo expuesto, se presenta la tabla mencionada (Tabla A11):

*Tabla A11: Tensión máxima admisible respecto de la temperatura para el Inconel 625.*

ASME B31.3-2018

**Table A-1 Basic Allowable Stresses in Tension for Metals (Cont'd)**  
Numbers in Parentheses Refer to Notes for Appendix A Tables; Specifications Are ASTM Unless Otherwise Indicated

---

Basic Allowable Stress, *S*, ksi, at Metal Temperature, °F [Note (1)]

---

650	700	750	800	850	900	950	1,000	1,050	1,100	1,150	1,200	1,250	1,300	1,350	1,400	1,450	1,500	1,550	1,600	1,650	UNS No. or Grade	Spec. No.
<b>Nickel and Nickel Alloy — Pipes and Tubes (4a) (Cont'd)</b>																						
37.4	37.0	36.6	36.3	36.1	35.8	35.4	31.2	31.2	23.1	21.0	13.2	...	...	...	...	...	...	...	...	...	N06625	B444
37.4	37.0	36.6	36.3	36.1	35.8	35.4	31.2	31.2	23.1	21.0	13.2	...	...	...	...	...	...	...	...	...	N06625	B705

A fin de facilitar la comprensión de la tabla anterior, se ha realizado un cambio de unidades para obtener una tabla con los valores de presión en MPa y la temperatura en °C (Tabla A13):

*Tabla A13: Tensión máxima admisible respecto a la temperatura para el Inconel 625*

Presión (ksi)	T (°F)	Presión (MPa)	T (°C)
37,4	650	257,7	343
37	700	254,9	371
36,6	750	252,2	399
36,3	800	250,1	427
36,1	850	248,7	454
35,8	900	246,7	482
35,4	950	243,9	510
31,2	1000	215,0	538
31,2	1050	215,0	566
23,1	1100	159,2	593
21	1150	144,7	621
13,2	1200	90,9	649

La presión máxima admisible para un tubo de Inconel 625 a 650 °C será de 90,9 MPa, este será el valor de la variable *S* en la ecuación 14.

En cuanto al factor de calidad de uniones, *E*, este se puede definir como el grado de fiabilidad que se puede tener en ellas. Este factor toma valores igual o menores que 1 y es una forma de reducir el esfuerzo admisible del material. Se considerará que las uniones han sido inspeccionadas en su

totalidad de forma que  $E=1$ . También se menciona en la norma ASME B31.3 (2018) que dicho factor tiene un valor de 1 para tubos de Inconel 625 en la tabla A-1B.

Para el factor de reducción de la resistencia de la junta de soldadura,  $W$ , debe atenderse a la norma ASME B31.3 (2018) como se muestra en la Tabla A14:

*Tabla A14: Factor de reducción de la resistencia de la junta de soldadura,  $W$*

Steel Group	Component Temperature, $T_b$ , °C (°F)														
	≤427 (≤800)	454 (850)	482 (900)	510 (950)	538 (1,000)	566 (1,050)	593 (1,100)	621 (1,150)	649 (1,200)	677 (1,250)	704 (1,300)	732 (1,350)	760 (1,400)	788 (1,450)	816 (1,500)
Carbon Steel	1	1	1	1	1	1	1	...	...	...	...	...	...	...	...
CrMo [Notes (1)-(3)]	1	0.95	0.91	0.86	0.82	0.77	0.73	0.68	0.64	...	...	...	...	...	...
CSEF (N + T) [Notes (3)-(5)]	...	...	...	1	0.95	0.91	0.86	0.82	0.77	...	...	...	...	...	...
CSEF [Notes (3) and (4)] (Subcritical PWHT)	...	...	1	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	...	...	...	...	...	...
Autogenous welds in austenitic stainless grade 3xx and N088xx and N066xx nickel alloys [Note (6)]	...	...	...	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Austenitic stainless grade 3xx and N088xx nickel alloys [Notes (7) and (8)]	...	...	...	1	0.95	0.91	0.86	0.82	0.77	0.73	0.68	0.64	0.59	0.55	0.5
Other materials [Note (9)]	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...

El Inconel 625 es una aleación que entra dentro del tipo N066xx de forma que el valor de  $W$  será 1. En cuanto al parámetro  $c$ , las tolerancias mecánicas son casi despreciables al no ser componentes roscados ni superficies ranuradas. Para la tolerancia por erosión se tomará un valor conservador de 1 mm. En la siguiente tabla se indican los valores del coeficiente  $Y$  para  $t < D/6$  y los materiales indicados (Tabla A15):

*Tabla A15: Valores de coeficiente  $Y$  [ASME B31.3 (2010)]*

Materiales	Temperatura, °C (°F)					
	≤ 482 (900 y menores)	510 (950)	538 (1,000)	566 (1,050)	593 (1,100)	≤ 621 (1,150 y mayores)
Aceros Ferríticos	0,4	0,5	0,7	0,7	0,7	0,7
Aceros Austeníticos	0,4	0,4	0,4	0,4	0,5	0,7
Otros metales dúctiles	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4
Hierro Fundido	0,0	...	...	...	...	...

El Inconel 625 se trata de una aleación austenítica y se precisa de su uso a temperaturas muy elevadas, por lo que el coeficiente  $Y$  será de 0,7.

En cuanto al caudal de operación, si bien este no será muy superior a los 100 L/h debido al elevado tiempo de residencia necesario y a la expansión volumétrica del caudal al alcanzar las condiciones de reacción, aún no está definido, y se seleccionará en consonancia con el diámetro del reactor. Para ello se atenderá a ciertos criterios como son la necesidad de régimen turbulento y la longitud del reactor,

interesa un caudal de operación elevado, pero un reactor de miles de metros es totalmente inviable. En las especificaciones de diseño se fijó, además, un diámetro nominal no superior a las 2" (60,32 mm).

Con los datos de las tuberías normalizadas que ofrece la empresa "TUBINOX" en su catálogo (Tabla A16) se realizarán cálculos de espesor para los diámetros más prometedores con el objetivo de maximizar el caudal de alimentación sin comprometer la viabilidad dimensional.

*Tabla A16: Dimensiones y pesos de los tubos según normas ASME B36.10 y B36.19 [17]\**

NPS	OD mm.	5S	10S	10	20	30	Std. 40S	40	60	XS 80S	80	100	120	140	160	XXS
1/8"	10,29		1,24 0,28				1,73 0,37	1,73 0,37		2,41 0,47	2,41 0,47					
1/4"	13,72		1,65 0,49				2,24 0,64	2,24 0,64		3,02 0,82	3,02 0,82					
3/8"	17,15		1,65 0,63				2,31 0,87	2,31 0,87		3,20 1,12	3,20 1,12					
1/2"	21,3	1,65 0,81	2,11 1,02	2,11 1,02			2,77 1,29	2,77 1,29		3,73 1,64	3,73 1,64				4,75 1,97	7,47 2,59
3/4"	26,7	1,65 1,03	2,11 1,30	2,11 1,30			2,87 1,71	2,87 1,71		3,91 2,23	3,91 2,23				5,54 2,93	7,82 3,69
1"	33,4	1,65 1,31	2,77 2,13	2,77 2,13			3,38 2,54	3,38 2,54		4,55 3,29	4,55 3,29				6,35 4,30	9,09 5,53
1 1/4"	42,2	1,65 1,67	2,77 2,73	2,77 2,73			3,56 3,44	3,56 3,44		4,85 4,53	4,85 4,53				6,35 5,69	9,70 7,88
1 1/2"	48,3	1,65 1,93	2,77 3,16	2,77 3,16			3,68 4,11	3,68 4,11		5,08 5,49	5,08 5,49				7,14 7,35	10,16 9,69
2"	60,3	1,65 2,42	2,77 3,99	2,77 3,99			3,91 5,52	3,91 5,52		5,54 7,60	5,54 7,60				8,71 11,26	11,07 13,65

\*Los valores negros corresponden al espesor en milímetros y los rojos al peso en kilogramos por metro.

La estrategia de resolución será, por tanto, calcular el espesor necesario para el mayor diámetro disponible y comprobar si se comercializan tuberías con el espesor requerido de Inconel 625. En el caso de que así sea, se calculará el caudal de alimentación con el que se obtenga un reactor de 400 metros de longitud y se verificará la condición de régimen turbulento. En cuanto a la limitación en la velocidad lineal mínima, esta no existe, ya que la corriente no contiene sólidos que puedan precipitar.

Si el espesor calculado es mayor que la sexta parte del diámetro exterior, según la norma ASME B31.3 (2018), el coeficiente Y debe calcularse con la siguiente expresión:

$$Y = \frac{d + 2c}{D + d + 2c} \tag{15}$$

En este caso, la norma indica que deben considerarse la importancia de factores como los esfuerzos térmicos y los efectos de fatiga, sin embargo, estos se considerarán despreciables por las condiciones de operación.

El cálculo a realizar es el siguiente:



$$t_m = \left( \frac{PD}{2(SEW + PY)} + c \right) M$$

$$t_m = \left( \frac{28,125 \cdot 0,06032}{2(90,9 \cdot 1,1 + 28,125 \cdot 0,7)} + 0,0015 \right) 1,125 = 10,32 \text{ mm} > \frac{60,32}{6} = 10,05 \text{ mm}$$

Como el espesor calculado supera la sexta parte del diámetro externo, debe calcularse el coeficiente Y a partir de la ecuación 15:

$$Y = \frac{d + 2c}{D + d + 2c} = \frac{(60,32 - 2 \cdot 10,32) + 2 \cdot 1,5}{60,32 + (60,32 - 2 \cdot 10,32) + 2 \cdot 1,5} = 0,41$$

Con este nuevo valor para el coeficiente Y se vuelve a calcular el espesor necesario:

$$t_m = \left( \frac{28,125 \cdot 0,06032}{2 \cdot (90,9 \cdot 1,1 + 28,125 \cdot 0,41)} + 0,0015 \right) 1,125 = 10,99 \text{ mm}$$

A continuación, se muestra la Tabla A17 en la que se recoge el cálculo anterior para el espesor mínimo necesario para los diámetros válidos de mayor tamaño (ecuaciones 13, 14 y 15):

*Tabla A17: Resultado del cálculo espesor mínimo para un diámetro nominal de 2 pulgadas*

CÁLCULO ESPESOR DE TUBERÍAS SOMETIDAS A PRESIÓN INTERNA ASME B311 Ø 2"		
VARIABLE	SIMBOLOGÍA	VALOR
Presión (MPa)	P	25
Presión diseño (MPa)	P <sub>d</sub>	28,125
Diámetro externo (mm)	D <sub>o</sub>	60,32
Eficiencia de junta	E	1
Tensión máxima permisible (MPa)	S	90,9
Corrosión (mm)	c	1,5
Coeficiente de distribución (t<D/6)	y	0,7
Tolerancia de fabricación	M	1,125
Espesor mínimo de tubería	t <sub>m</sub>	10,32
Coeficiente de distribución (t>D/6)	y'	0,41
Espesor mínimo de tubería (t>D/6)	t <sub>m</sub> '	10,99

El mayor espesor comercializado por la empresa "TUBINOX" para tubos de 2" de diámetro nominal es de 11,07 mm, el cual es suficiente para la presión de diseño, por lo que el siguiente paso es estudiar la influencia del caudal de alimentación en un reactor con este diámetro en cuanto a su longitud y régimen de flujo.

En la siguiente Tabla A18, se muestra la influencia del caudal de alimentación sobre la longitud del reactor necesario, así como el régimen de flujo en el interior del mismo:

*Tabla A18: Cálculo del caudal de operación óptimo para una tubería 2" XXS*

<b>Selección de diámetro y longitud del reactor d=38,18 mm <math>\tau</math>=11,27 min</b>					
Q (L/s)	Q (L/h)	V lineal reactor (m/s)	Volumen reactor (L)	Longitud (m)	Re (650°C 25MPa)
0,034	122	0,473	366,30	319,95	32134
0,035	126	0,487	377,08	329,36	33079
0,036	130	0,501	387,85	338,77	34024
0,037	133	0,515	398,62	348,18	34969
0,038	137	0,529	409,40	357,59	35914
0,039	140	0,543	420,17	367,00	36860
0,040	144	0,557	430,94	376,41	37805
0,041	148	0,571	441,72	385,82	38750
0,042	151	0,585	452,49	395,23	39695
0,043	155	0,598	463,27	404,64	40640
0,044	158	0,612	474,04	414,05	41585
0,045	162	0,626	484,81	423,46	42530
0,046	166	0,640	495,59	432,87	43475
0,047	169	0,654	506,36	442,28	44420
0,048	173	0,668	517,13	451,69	45366
0,049	176	0,682	527,91	461,10	46311
0,050	180	0,696	538,68	470,51	47256
0,051	184	0,710	549,45	479,92	48201
0,052	187	0,724	560,23	489,33	49146

El caudal de operación para obtener un reactor de 400 metros se encuentra entre 151 y 155 L/h. Dicho caudal se ha obtenido de forma precisa de mediante la función “Buscar objetivo” en Excel, como se muestra en la siguiente Tabla A19, pero era interesante ver la influencia del caudal en la longitud del reactor.

Si el reactor fuese de 500 metros podría aumentarse el caudal unos 40 L/h lo cual podría justificar el aumento de longitud del mismo, pero, como se indicó anteriormente, se trata de una instalación a escala de planta piloto y el principal objetivo es el estudio de la viabilidad de la operación de la propia planta. Si el objetivo, por el contrario, fuese tratar la mayor corriente posible para maximizar los beneficios, la instalación y reactor serían mucho más grandes, pero para una planta piloto un reactor de 400 metros ya es lo suficientemente grande.

Por otro lado, la velocidad lineal en el interior del reactor no alcanza los 2 m/s que se suele imponer para que tenga lugar el completo arrastre de sólidos, sin embargo, como la corriente a tratar no contiene ni genera ningún material sólido, esto no supone problema alguno. Asimismo, el reactor contará con una disposición espacial ligeramente descendente para evitar la deposición de sólidos inesperados.

*Tabla A19: Resultado del cálculo caudal de operación y Re para diámetro nominal de 2" XXS*

CÁLCULO CAUDAL DE OPERACIÓN PARA REACTOR DE Ø 2"		
VARIABLE	SIMBOLOGÍA	VALOR
Diámetro externo (mm)	D	60,32
Espesor de tubería comercial (mm)	t	11,07
Diámetro interno (mm)	d	38,18
Caudal volumétrico (L/h)	Q	153,03
Volumen reactor (L)	V	457,95
Longitud del reactor (m)	L	400
Re (650°C 25MPa)	Re	40174
L/D	-	6631,30

El caudal de alimentación deberá ser, por tanto, de 153 L/h para que en un reactor de 400 metros se alcance el grado de conversión requerido.

Canto mayor es el diámetro externo de la conducción, mayor es el espesor requerido en la misma para soportar la presión de diseño, por lo que sería interesante estudiar el caso de un diámetro algo menor para asegurar que se ha dado con la mejor opción.

Se muestra, a continuación, la Tabla A20 con el resultado del cálculo para un diámetro nominal de 1 1/2 pulgadas:

*Tabla A20: Resultado del cálculo espesor mínimo para un diámetro nominal de 1 1/2 pulgadas*

CÁLCULO ESPESOR DE TUBERÍAS SOMETIDAS A PRESIÓN INTERNA ASME B311 Ø 1 1/2"		
VARIABLE	SIMBOLOGÍA	VALOR
Presión (MPa)	P	25
Presión diseño (MPa)	P <sub>d</sub>	28,125
Diámetro externo (mm)	D <sub>o</sub>	48,26
Eficiencia de junta	E	1
Tensión máxima permisible (MPa)	S	90,9
Corrosión (mm)	c	1,5
Coefficiente de distribución (t<D/6)	γ	0,7
Tolerancia de fabricación	M	1,125
Espesor mínimo de tubería	t <sub>m</sub>	8,59
Coefficiente de distribución (t>D/6)	γ'	0,41
Espesor mínimo de tubería (t>D/6)	t <sub>m</sub> '	9,13

En la anterior Tabla A16 se observa que la empresa "TUBINOX" ofrece tubos de 1 1/2" con un espesor de 10,16 mm, los cuales podrían soportar la presión de diseño, sin embargo, su diámetro interno sería menor que para el caso anterior, lo que se traduce en una mayor longitud necesaria para un reactor del mismo volumen.

A continuación se muestra la Tabla A21 con las dimensiones del reactor necesarias para distintos caudales de operación:

*Tabla A21: Estudio de la influencia del caudal de operación para un diámetro nominal de 1 1/2" XXS*

<b>Selección de diámetro y longitud del reactor</b> <b>d=27,94 mm <math>\tau=11,27</math> min</b>					
Q (L/s)	Q (L/h)	V lineal reactor (m/s)	Volumen reactor (L)	Longitud (m)	Re (650°C 25MPa)
0,020	72	0,520	215,47	351,44	25830
0,022	77	0,559	231,63	377,80	27767
0,023	83	0,598	247,79	404,15	29705
0,025	88	0,637	263,95	430,51	31642
0,026	94	0,676	280,11	456,87	33579
0,028	99	0,715	296,27	483,23	35516
0,029	104	0,754	312,43	509,58	37454
0,031	110	0,793	328,60	535,94	39391
0,032	115	0,832	344,76	562,30	41328
0,034	121	0,871	360,92	588,66	43265
0,035	126	0,910	377,08	615,02	45203
0,037	131	0,949	393,24	641,37	47140
0,038	137	0,988	409,40	667,73	49077
0,040	142	1,027	425,56	694,09	51014
0,041	148	1,066	441,72	720,45	52952
0,043	153	1,105	457,88	746,81	54889
0,044	158	1,144	474,04	773,16	56826
0,046	164	1,183	490,20	799,52	58763
0,047	169	1,221	506,36	825,88	60701

En la anterior Tabla A21 se observa que para alcanzar la condición mínima de un caudal de 100 L/h, el reactor debe ser de más de 480 metros. Además, para poder trabajar con el caudal de 153 L/h, el reactor debería superar los 700 metros. Si bien es cierto que este diámetro conlleva velocidades lineales superiores, al no existir sólidos en la corriente este factor no es de importancia en el diseño. Todo esto conduce a la elección de un tubo de Inconel 625 de 2" de diámetro nominal con un espesor de 11,07 mm (2" XXS), además, también queda fijado el caudal de operación en 153 L/h.

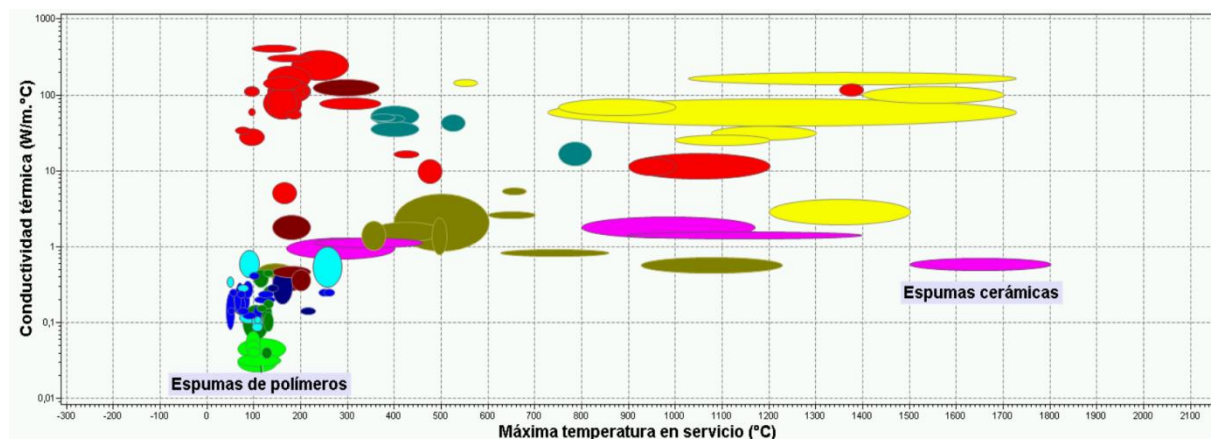
#### **4.4 CÁLCULO DEL AISLANTE**

Como se indicó en las especificaciones de diseño, el reactor que se pretende diseñar trabajará de forma adiabática, es decir, sin intercambio de calor con el exterior. En la práctica esto es un objetivo imposible de alcanzar, pero sí puede disminuirse dicha transferencia hasta valores muy pequeños mediante el uso de aislantes térmicos. En el presente apartado se desarrollará la selección del aislante más adecuado y el cálculo del espesor del mismo necesario para reducir al mínimo la transferencia de calor del reactor con el exterior. Como primer paso, se definirá que es el aislamiento térmico y los requerimientos de los materiales que puedan servir como aislantes.

El aislamiento térmico es el proceso de reducir la transferencia de calor entre dos superficies, ya sea para mantener la temperatura dentro de un espacio o equipo, o para proteger a las personas de superficies calientes. Esto se logra utilizando materiales que tienen baja conductividad térmica, es decir, materiales que presentan alta resistencia al flujo de calor. El aislamiento térmico es importante en la construcción y el mantenimiento de edificios, equipos y sistemas, ya que puede mejorar la eficiencia energética y reducir sus costes.

El reactor que se pretende diseñar, así como el resto de conducciones cercanas al mismo, se encuentra a temperaturas muy altas (hasta 650 °C), por lo que es de vital importancia que el aislante seleccionado sea capaz de aguantar ese rango de operación. Al ser una temperatura tan elevada se prevé un espesor relativamente grande del aislante necesario, por lo que se buscarán materiales con coeficientes de conductividad térmica muy bajos. Sin embargo, el coste del mismo también es importante, puede ser más rentable usar más cantidad de un material barato que poca de uno muy caro. Por ende, se trata de un compromiso entre el grosor y el precio, aunque se deben considerar otros factores, como la durabilidad y la resistencia a la humedad, y puede resolverse utilizando uno o varios materiales aislantes en serie.

A continuación, se muestra la Figura A34, obtenida a partir del software CES EduPack 2018, donde se representan los distintos materiales en función de su conductividad térmica y su máxima temperatura de servicio:



*Figura A34: Comparación de los distintos materiales, CES EduPack 2018*

Los materiales con mayor interés para su uso como aislantes térmicos son aquellos que se encuentran en la parte inferior de la anterior Figura A33. Sin embargo, como la pared del reactor se encontrará a casi 650 °C, se precisa de un aislante que soporte dicha temperatura de operación, es decir, que no se encuentre muy a la izquierda como las espumas de polímeros, que son aquellos materiales que presentan menor conductividad térmica. Sería interesante, por tanto, utilizar un material intermedio entre las espumas de polímeros y las cerámicas, que tenga una conductividad térmica similar a las

primeras y una temperatura máxima de servicio como las segundas. El software mencionado sirve para comparar materiales de construcción de cualquier equipo, por lo que, materiales con uso exclusivo como aislantes, no aparecen representados en el gráfico y sus propiedades deben estudiarse aparte.

Se ha realizado una búsqueda de los materiales aislantes más empleados en la industria que soporten altas temperaturas de operación. Los principales aislantes que se comercializan son:

- **Fibra cerámica refractaria:** Es un material utilizado como aislante térmico en aplicaciones de alta temperatura. Es resistente a la corrosión y a los productos químicos y puede soportar temperaturas de hasta 1650 °C. Además, es un material ligero y fácil de manejar, siendo ideal para aplicaciones en las que se requiere una instalación rápida y sencilla. Presenta valores de conductividad térmica de 0,24 W/m·K a 800 °C y 0,1 W/m·K a 400 °C, aunque esta característica depende de la densidad, y su uso no se recomienda para temperaturas inferiores a 300 °C [18].
- **Fibra de vidrio (lana de vidrio):** Es uno de los materiales que se emplean con mayor frecuencia en los proyectos de aislamiento acústico o térmico debido a su baja conductividad y precio. Está compuesta por arena de sílice, carbonato de sodio y caliza. Además de ser un material ignífugo, no resulta tóxico y es un material respetuoso con el medio ambiente, pero su temperatura máxima de operación es de 450 °C. Presenta una conductividad térmica de entre 0,03 y 0,071 W/m·K según la norma UNE-EN 12667:2002 [19].
- **Lana mineral (lana de roca):** Es un material aislante formado por fibras entrelazadas de materiales de origen animal. El aire que queda confinado entre las fibras es lo que dota al material de sus excelentes propiedades térmicas y acústicas. Presenta valores de conductividad térmica muy bajos, entre 0,030 y 0,049 W/m·K. Además, es un aislante incombustible, por lo que presenta un excelente comportamiento frente al fuego. Puede soportar temperaturas de hasta 650 °C.
- **Silicato de calcio:** Es un aislante elegido para tuberías y equipos de alta temperatura debido a su alta resistencia y durabilidad, baja conductividad térmica y rendimiento de inhibición de la corrosión. Está especialmente recomendado para usos donde las tuberías y los equipos operan hasta los 650 °C. Sin embargo, su conductividad térmica no es tan baja como las del resto de aislantes mencionados hasta ahora, siendo superior a 0,1 W/m·K a 300 °C.
- **Aerogel:** Es un material aislante térmico de alta tecnología que se utiliza en aplicaciones de alta eficiencia energética y resistencia al fuego. Es un material extremadamente ligero y poroso, compuesto por más del 90% de aire, lo que le da una excelente capacidad de aislamiento térmico. Es un material resistente a la humedad y al fuego y a diferencia de otros aislantes no se quema ni libera gases tóxicos cuando se expone al fuego. Se han encontrado datos sobre su conductividad térmica que se mueven en una horquilla de entre 0,01 y 0,018 W/m·K, pero en ninguno aparece referenciado su estudio bajo una norma. Por contra, es un material caro y frágil y no se encuentra muy comercializado, por lo que es difícil encontrar fuentes de información fiables.

Para el cálculo del espesor de aislante necesario se atenderá a la Guía técnica “Diseño y cálculo del aislamiento térmico de conducciones, aparatos y equipos” [20], la cual presenta modos de cálculo según el objetivo energético a conseguir. Entre estos objetivos se encuentran, por ejemplo, el cálculo para un tiempo de congelación específico, el espesor más económico o una temperatura superficial determinada, siendo este último el objetivo que se buscará lograr. Según la norma UNE-EN ISO 12241:2010 “Aislamiento térmico para equipos de edificación e instalaciones industriales” [21], la temperatura máxima para equipos industriales que estén expuestos al posible contacto es de 60 °C. Como el reactor que se pretende diseñar forma parte de una instalación industrial y no se encuentra aislado físicamente, se deberá calcular el espesor necesario para que la temperatura superficial del mismo sea de 60 °C como máximo. Sin embargo, debido a la gran longitud del reactor, se buscará alcanzar una temperatura superficial de 40 °C para minimizar las pérdidas energéticas.

En cuanto al material aislante, se ha decidido utilizar una primera capa hecha de lana mineral, al ser este el material comercial por excelencia para temperaturas altas del que más información se ha encontrado. Luego, el reactor estará recubierto de otra capa de aislante, de lana de vidrio, cuando la temperatura de la superficie del primer aislante sea menor de 300 °C, que conseguirá que la temperatura de la superficie exterior se encuentre como máximo a 60 °C.

Debe calcularse, y reducirse, el flujo de calor entre el interior de la tubería y el ambiente externo de la misma. Para ello, se atenderá a la ecuación general de transferencia de calor (ec. 16)

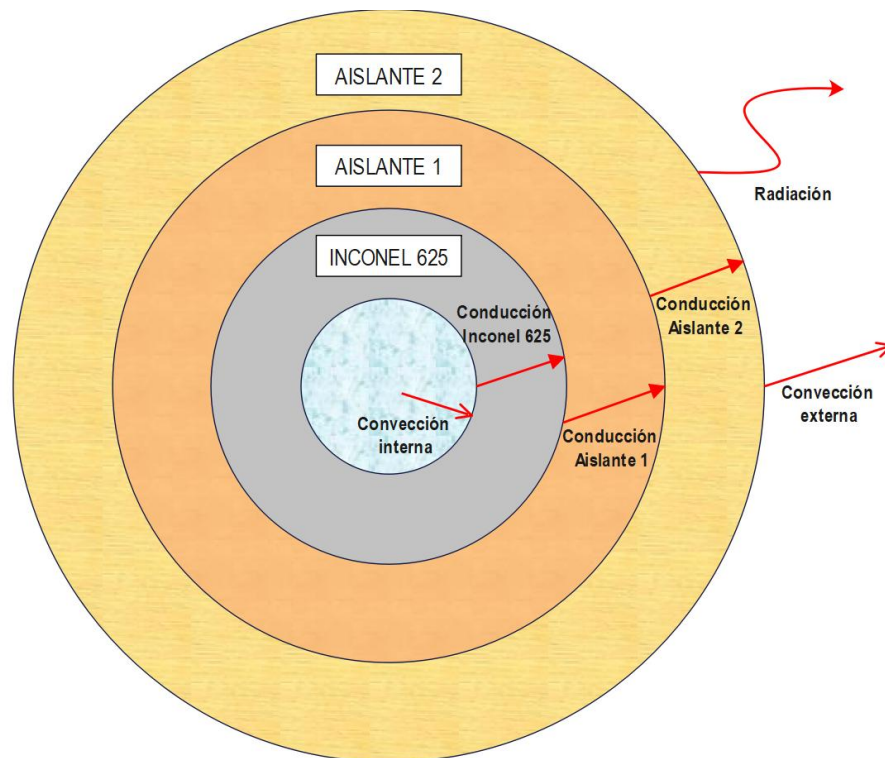
$$Q = \frac{\text{Fuerza impulsora}}{\text{Resistencia total}} = \frac{\Delta T}{R_{\text{total}}} \quad (16)$$

Es decir, la fuerza impulsora de la transferencia de calor es la diferencia de temperaturas entre ambos focos. Dicha diferencia es conocida, puesto que la temperatura del fluido interior de la tubería es de 650 °C (temperatura máxima) y la del exterior es la temperatura ambiente. La temperatura ambiente no es constante durante todo el año, pero, al encontrarse en un ambiente de trabajo, existen convenios sobre la temperatura del mismo, siendo así una horquilla de temperaturas mucho menor. Según el Real Decreto 178/2021, las temperaturas operativas de equipos de refrigeración y calefacción deben estar entre 21 y 25 °C, por lo que se realizará el cálculo del aislante necesario para una temperatura ambiente de 21 °C [22].

Como se muestra en la anterior ecuación 16, existe una resistencia térmica que se opone a la transferencia de calor, el concepto de resistencia global permite agrupar procesos distintos que estén dispuestos en serie o en paralelo, mediante el dibujo del circuito térmico que corresponda y simplificándolo según las reglas de los circuitos eléctricos. Por tanto, lo importante en este momento es conocer la disposición de las distintas resistencias que se oponen a la transferencia de calor. La transferencia de calor ocurre siempre del foco caliente al foco frío, es decir, del interior de la tubería

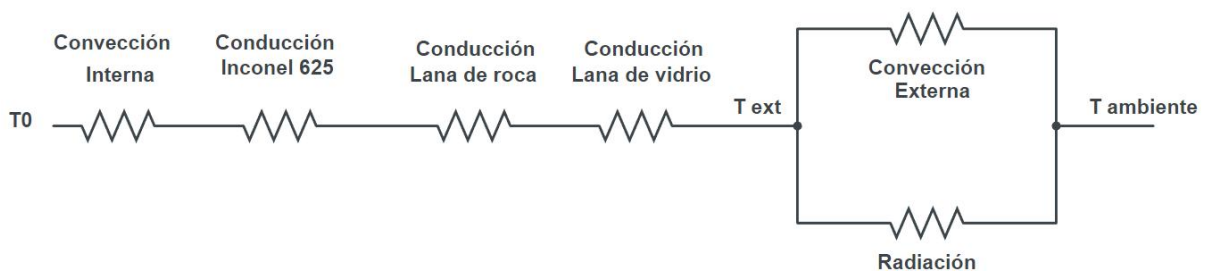
hasta el ambiente externo de la misma. Siguiendo el orden de transmisión, primero se produciría la convección interna hasta la pared de la tubería de Inconel 625, posteriormente tendrá lugar una transferencia por conducción a través de las paredes de la propia tubería, luego se encuentra otro sólido, por lo que se vuelve a hablar de conducción a lo largo del primer aislante y, más adelante, del segundo. Por último, se presenta un fenómeno de transferencia de calor por dos vías, convección natural con el aire exterior y radiación por el simple hecho de tener una temperatura por encima del 0 absoluto.

A continuación, se presenta en la Figura A35 una representación de la transmisión de calor de forma radial en el sistema compuesto por el reactor y los dos aislantes:



*Figura A35: Representación de la transferencia de calor en el reactor*

A continuación, se muestra en la Figura A36 la analogía del sistema térmico en estudio con un circuito eléctrico:



*Figura A36: Esquema del circuito eléctrico equivalente*



En la anterior Figura A36 se muestran todas las resistencias a la transferencia de calor en el sistema. El siguiente paso no es otro que calcular la resistencia total siguiendo las reglas de los circuitos eléctricos: Si las resistencias se encuentran en serie:

$$R_{Total} = R_1 + R_2 + R_3 \dots$$

Si las resistencias se encuentran en paralelo:

$$\frac{1}{R_{Total}} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} + \frac{1}{R_3} \dots$$

De esta forma, la resistencia global está conformada por 6 resistencias que se dividen en 3 tipos: convección, conducción y radiación. A partir de este punto, se expresará la transferencia de calor por unidad de longitud, puesto que es una constante en todas las capas y carece de sentido ir multiplicando y dividiendo por su valor. A continuación, se mostrará individualmente el cálculo correspondiente a cada resistencia térmica:

$$R_{conducción} = \ln(r_{ext}/r_{int})/2\pi k$$

$$R_{convección} = \frac{1}{2 \pi r h_{conv}}$$

$$R_{radiación} = \frac{1}{2 \pi r h_{radiación}}$$

A continuación, se presenta la ecuación 17, resultado de aplicar las leyes de circuitos eléctricos sobre el esquema de la Figura A36 para obtener la resistencia a la conducción total:

$$R_{cond\_total} = \frac{\ln(r_{r\ ext}/r_{r\ int})}{2 \pi k_{Inconel}} + \frac{\ln(r_{Aislante\ LR}/r_{r\ ext})}{2 \pi k_{LR}} + \frac{\ln(r_{LV}/r_{Aislante\ LR})}{2 \pi k_{LV}} \quad (17)$$

Siendo:

-LR: Lana de roca (lana mineral).

-LV: Lana de vidrio.

- $r_{r\ ext}$ : Radio externo del reactor.

- $r_{r\ int}$ : Radio interno del reactor.

Agrupando la resistencia a la conducción total y las resistencias por convección interna, externa y radiación, se llega a la ecuación 18:

$$R_{total} = \frac{1}{2\pi r_{int} h_{conv\_int}} + R_{cond\_total} + \frac{1}{2\pi r_{LV} h_{conv\_ext} + 2\pi r_{LV} h_{radiación}} \quad (18)$$

Para obtener la ecuación de transferencia de calor global al sistema en estudio se sustituye la ecuación 18 en la ecuación 16:

$$Q = \frac{T_0 - T_\infty}{\frac{1}{2\pi r_{int} h_{cv_{int}}} + \frac{\ln(r_{r_{ext}}/r_{r_{int}})}{2\pi k_{Inconel}} + \frac{\ln(r_{LR}/r_{r_{ext}})}{2\pi k_{LR}} + \frac{\ln(r_{LV}/r_{LR})}{2\pi k_{LV}} + \frac{1}{2\pi r_{LV}(h_{cv_{ext}} + h_{rad})}}$$

(19)

Para resolver la ecuación 19 se necesitan los coeficientes de conducción del Inconel 625, de la lana mineral y de la lana de vidrio, además de calcular los coeficientes de convección y el de radiación.

● **Coeficiente de convección interno**

Para el cálculo de los coeficientes de convección se utiliza la relación entre la transmisión de calor por convección y por conducción del fluido, es decir, el número de Nusselt, que es un coeficiente que indica cuánto mejora la convección a la conducción y su expresión es la siguiente:

$$Nu = \frac{Q_{conv}}{Q_{cond}} = \frac{h \cdot A \cdot \Delta T}{k \cdot A \cdot \frac{\Delta T}{L}}$$

Reagrupando términos se obtiene la ecuación 20:

$$Nu = \frac{h \cdot L}{k}$$

(20)

En la expresión anterior, L se corresponde con el diámetro interno de la conducción. A continuación, se muestra la Tabla A22, procedente del libro “Transferencia de calor y masa” de Yunus Cengel [23], correspondiente a la expresión para el cálculo del Nusselt para convección interna en tuberías cilíndricas:

*Tabla A22: Ecuación de cálculo de Nu para tuberías cilíndricas, Cengel*

ECUACIÓN	CONDICIONES
$Nu = 4,36$	Laminar, Desarrollado, flujo de calor constante
$Nu = 3,66$	Laminar, Desarrollado, Temperatura superficial constante
$Nu = 3,66 + \frac{0,065 \cdot (D/L) \cdot Re \cdot Pr}{1 + 0,04 \cdot [(D/L) \cdot Re \cdot Pr]^{2/3}}$	Laminar, Longitud de entrada térmica, Temperatura superficial constante
$Nu = 1,86 \cdot \left(\frac{Re \cdot Pr}{L/D}\right)^{1/3} \cdot \left(\frac{\mu}{\mu_s}\right)^{0,14}$	Laminar, Longitud de entrada combinada, Temperatura superficial constante
$Nu = 0,023 \cdot Re^{0,8} \cdot Pr^n$	Turbulento, Completamente desarrollado. n= 0,4 calentamiento n= 0,3 enfriamiento

Como se observa en la anterior Tabla A22, la ecuación para el cálculo del Nusselt varía según el régimen de flujo, en el caso en estudio debe usarse la expresión de la última fila de la tabla por tratarse de un flujo turbulento con enfriamiento:

$$\text{Nu} = 0,023 \cdot \text{Re}^{0,8} \cdot \text{Pr}^{0,3} \quad (21)$$

El cálculo está referido a la zona del reactor por donde circula la corriente a mayor temperatura (650 °C), por lo que las propiedades de la corriente vendrán referidas, también, a las del sistema en ese punto, es decir, a la entrada al reactor. El cálculo de Re y Pr se realiza mediante las siguientes expresiones:

$$\text{Re} = \frac{\rho \cdot v \cdot \text{LC}}{\mu}$$

Siendo “LC” la longitud característica del sistema que, en el caso de una conducción cilíndrica, es el diámetro interno. Como se indicó en el Anexo 3, las propiedades de la corriente en el interior del reactor se aproximarán a las del agua pura, por lo que se precisa del calor específico, densidad, viscosidad dinámica y coeficiente de conducción de la misma a 25 MPa y 650 °C. Todas estas propiedades del agua pura se obtendrán de la base de datos de química del NIST.

El cálculo de los números adimensionales necesarios se presenta a continuación:

$$\text{Re} = \frac{4 \cdot Q \cdot \rho}{\pi \cdot D_{\text{int}} \cdot \mu} = \frac{4 \cdot 0,0000425 \cdot 15,93 \cdot 64,81}{\pi \cdot 0,03818 \cdot 3,6439 \cdot 10^{-5}} = 40156,4$$

Es importante mencionar que 15,93 es el cociente entre el caudal en el interior y exterior del reactor (650 °C y 25 MPa frente a 25 °C y 1 atm).

$$\text{Pr} = \frac{3,6439 \cdot 10^{-5} \cdot 2814,5}{0,10871} = 0,9434$$

A continuación, se sustituyen estos valores en la ecuación 21 para el cálculo del Nusselt:

$$\text{Nu} = 0,023 \cdot 40156,4^{0,8} \cdot 0,9434^{0,3} = 108,93$$

Una vez conocido el valor del Nusselt es posible calcular el coeficiente de convección interna mediante la ecuación 20:

$$\text{Nu} = \frac{h \cdot L}{k} ; h_{\text{int}} = \frac{\text{Nu} \cdot k}{D_{\text{int}}} = \frac{108,93 \cdot 0,10871}{0,03818} = 310,15 \text{ W/m}^2\text{K}$$

De la ecuación de transferencia de calor mediante convección no se conoce el flujo de calor transmitido ni la temperatura de la pared interna del reactor, por lo que aún no puede aplicarse la misma.

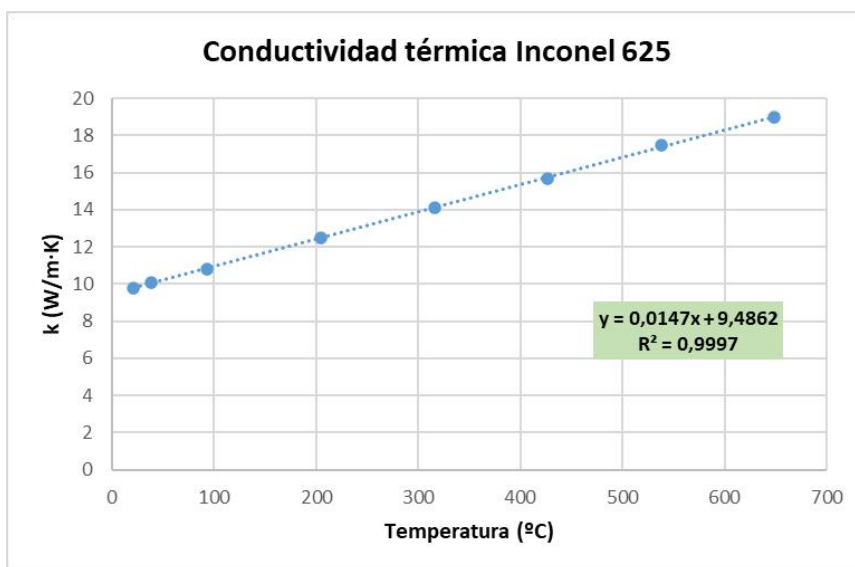
- Conductividad térmica del Inconel 625

Para la conductividad térmica del Inconel 625 se atenderá a la bibliografía. A continuación, se muestra la Tabla A23 con la conductividad térmica del Inconel 625 en función de la temperatura:

*Tabla A23: Propiedades térmicas del Inconel 625, Special Metals*

Temp °C	Mean Linear Expansion <sup>a</sup> μm/ μm•°C	Thermal Conductivity <sup>b,c</sup> W/m•°C
-157	-	7.2
-129	-	7.5
-73	-	8.4
-18	-	9.2
21	-	9.8
38	-	10.1
93	12.8	10.8
204	13.1	12.5
316	13.3	14.1
427	13.7	15.7
538	14.0	17.5
649	14.8	19.0
760	15.3	20.8
871	15.8	22.8
927	16.2	-
982	-	25.2
1093	-	-

Para el cálculo de la transferencia de calor por conducción se debe utilizar el valor de la conductividad térmica a la temperatura media del material. Debido a los elevados valores de conductividad térmica del Inconel 625, no se espera una disminución de más de un par de grados a lo largo del mismo. Sin embargo, no se conoce la temperatura de la pared interna del reactor, está en contacto con el fluido a 650 °C (en la zona de mayor temperatura) pero eso no implica que la pared del reactor se encuentre a esa temperatura. Por tanto, se ha realizado una regresión lineal que permita conocer la conductividad térmica del Inconel 625 en función de la temperatura. A continuación, se muestra la Figura A37 con la evolución de esta propiedad con la temperatura:



*Figura A37: Evolución de la conductividad térmica del Inconel 625 con la temperatura*

Ambas variables se relacionan mediante la siguiente expresión:

$$k = 0,0147 \cdot T + 9,4862$$

Siendo  $R^2 = 0,9997$

De la ecuación de transferencia de calor mediante conducción para la pared del reactor no se conoce el flujo de calor transmitido ni la temperatura de las caras externa e interna de la pared del reactor, por lo que aún no puede aplicarse la misma.

- Conductividad térmica de la lana mineral

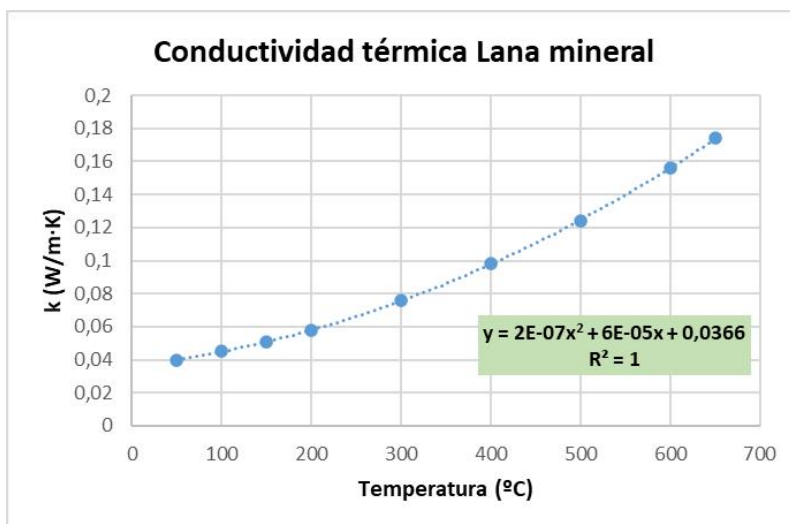
Como es la primera capa es de vital importancia que esta se amolde a la perfección a la tubería, por lo que se usarán coquillas de lana mineral, reduciendo así la posibilidad de que se produzcan puentes térmicos. Atendiendo al catálogo de la empresa “ISOVER”, de entre sus múltiples opciones, se ha seleccionado el aislamiento industrial para tuberías U TECH Pipe Section MT 4.0, conformado por lana mineral ULTIMATE con forma cilíndrica y estructura concéntrica, que además, llevan practicada una abertura en su generatriz para permitir su colocación sobre la tubería. Se ha seleccionado este material por encima de otros por presentar una menor conductividad térmica y una mayor temperatura superficial de exposición.

A continuación, se muestra una tabla (Tabla A24) con los valores de conductividad térmica del aislante mencionado según la temperatura media en el aislamiento:

*Tabla A24: Conductividad térmica de la lana mineral, ISOVER [24]*

Conductividad térmica									
Temp.* (°C)	50	100	150	200	300	400	500	600	650
$\lambda$ (W/m·K)	0,040	0,045	0,051	0,058	0,076	0,098	0,124	0,156	0,174

Para tuberías con un diámetro nominal de 2” el mayor espesor que se comercializa es de 60 mm, debido a la gran temperatura de exposición se seleccionará dicho espesor. A continuación, se muestra en la Figura A38 la evolución de la conductividad térmica de la lana de roca con la temperatura:



*Figura A38: Evolución de la conductividad térmica de la lana mineral con la temperatura*

Ambas variables se relacionan mediante la siguiente expresión:

$$k = 2,3038 \cdot 10^{-7} \cdot T^2 + 6,1074 \cdot 10^{-5} \cdot T + 0,03656$$

$$\text{Siendo } R^2 = 0,9998$$

Al igual que ocurre para la pared del reactor, no se conoce el flujo de calor a través de la capa del primer aislante ni la temperatura de las caras externa e interna del mismo.

● **Conductividad térmica de la lana de vidrio**

De la misma forma que para la lana mineral, se han estudiado aquellos materiales que presentaban una menor conductividad térmica. Se ha seleccionado para esta segunda capa de aislante el TECH Wired Mat MT 4.0 formado por, como se indicó anteriormente que se buscaría, lana de vidrio. Tiene una temperatura máxima de exposición superficial de 400 °C y su conductividad térmica en función de la temperatura se muestra en la siguiente Tabla A25:

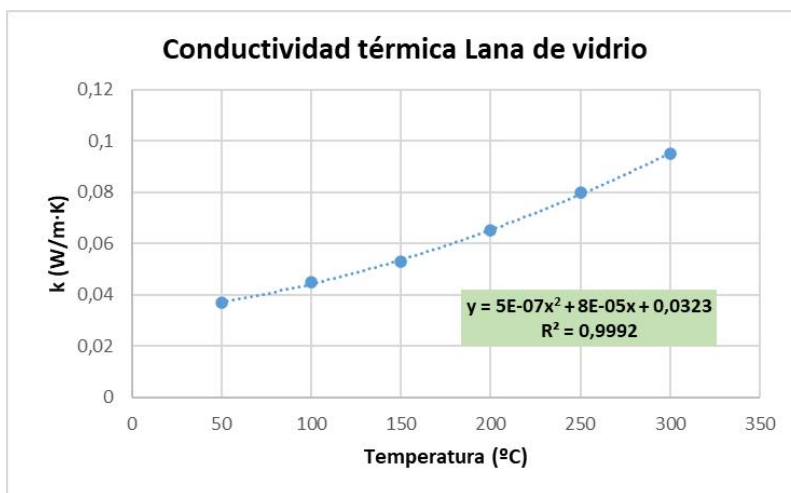
*Tabla A25: Conductividad térmica de la de vidrio, ISOVER [25]*

Conductividad térmica

T °C *	-20	50	100	150	200	250	300
λ (W/m·K)	0,029	0,037	0,045	0,053	0,065	0,080	0,095

\* Temperatura media en el aislamiento. Según Norma EN 8497.

A continuación, se muestra en la Figura A39 la evolución de la conductividad térmica de la lana de roca con la temperatura:



*Figura A39: Evolución de la conductividad térmica de la lana de vidrio con la temperatura*

A continuación, se presenta la ecuación resultante de realizar una regresión polinómica sobre los datos de la Tabla A25:

$$k = 4,5000 \cdot 10^{-7} \cdot T^2 + 7,5071 \cdot 10^{-5} \cdot T + 0,0323$$

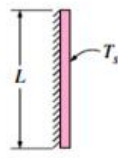
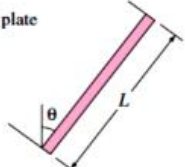
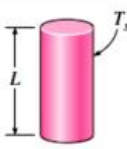

$$\text{Siendo } R^2 = 0,9992$$

Para el caso del segundo aislante no se conoce el espesor del mismo, pero sí la temperatura de su cara externa, puesto que esta es la temperatura de diseño. Dicha temperatura será, en un principio, 40 °C, con la posibilidad de aumentarla si se necesitase de un espesor demasiado grande de aislante para su consecución.

● Coeficiente de convección externo

Para el cálculo del coeficiente de convección externo se procederá de la misma manera que para el coeficiente interno, la diferencia con el caso anterior es que ahora el fluido es aire a presión atmosférica y 21 °C, además de que se trata de convección natural, en vez de forzada como era para la convección interna. A continuación, se muestra la Tabla A26 que recoge la ecuación para el cálculo del Nusselt para convección natural según la geometría del sistema:

*Tabla A26: Correlaciones empíricas para Nu según la geometría del sistema, Cengel*

TABLE 9-1			
Empirical correlations for the average Nusselt number for natural convection over surfaces			
Geometry	Characteristic length $L_c$	Range of Ra	Nu
Vertical plate 	$L$	$10^4-10^9$ $10^9-10^{13}$ Entire range	$Nu = 0.59Ra^{1/4}$ (9-19) $Nu = 0.1Ra^{1/3}$ (9-20) $Nu = \left\{ 0.825 + \frac{0.387Ra^{1/6}}{[1 + (0.492/Pr)^{9/16}]^{8/27}} \right\}^2$ (9-21) (complex but more accurate)
Inclined plate 	$L$		Use vertical plate equations for the upper surface of a cold plate and the lower surface of a hot plate  Replace $g$ by $g \cos\theta$ for $Ra < 10^9$
Vertical cylinder 	$L$		A vertical cylinder can be treated as a vertical plate when  $D \geq \frac{35L}{Gr^{1/4}}$
Horizontal cylinder 	$D$	$Ra_D \leq 10^{12}$	$Nu = \left\{ 0.6 + \frac{0.387Ra^{1/6}}{[1 + (0.559/Pr)^{9/16}]^{8/27}} \right\}^2$ (9-25)

Como se observa en la anterior Tabla A26, la ecuación que se utilizará para el cálculo del Nu es la siguiente:

$$Nu = \left\{ 0,6 + \frac{0,387Ra^{1/6}}{[1 + (0,599/Pr)^{9/16}]^{8/27}} \right\}^2 \tag{22}$$

Como se puede ver, la expresión del Nusselt depende de dos números adimensionales, el Rayleigh (Ra) y el Prandtl (Pr), los cuales hay que determinar para poder resolver la ecuación anterior:

$$Ra = \frac{g \cdot \beta \cdot (T_s - T_\infty) \cdot LC^3}{\alpha \cdot \nu}$$

Siendo:

-g: Aceleración de la gravedad de la tierra (m/s<sup>2</sup>)

-β: Coeficiente de expansión volumétrica (1/K)

-α: Difusividad térmica (m<sup>2</sup>/s)

-ν: Viscosidad cinemática (m<sup>2</sup>/s)

-LC: Longitud característica, diámetro externo para el caso en estudio (m)

Se debe tener en cuenta el efecto de la variación de las propiedades, por lo que se tomarán a la temperatura de película:

$$T_f = \frac{1}{2}(T_s + T_\infty)$$

Por tanto:

$$T_f = \frac{1}{2}(40 + 21) = 30,5 \text{ } ^\circ\text{C}$$

Las propiedades termofísicas del aire a presión atmosférica se encuentran tabuladas. A continuación, se presenta una tabla (Tabla A27) con los valores de estas propiedades termofísicas en función de la temperatura:

*Tabla A27: Propiedades termofísicas del aire a 1 atm, Cengel*

Propiedades del aire a la presión de 1 atm

Temp., T, °C	Densidad, ρ, kg/m <sup>3</sup>	Calor específico, c <sub>p</sub> , J/kg · K	Conductividad térmica, k, W/m · K	Difusividad térmica, α, m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>	Viscosidad dinámica, μ, kg/m · s	Viscosidad cinemática, ν, m <sup>2</sup> /s	Número de Prandtl Pr
-150	2.866	983	0.01171	4.158 × 10 <sup>-6</sup>	8.636 × 10 <sup>-6</sup>	3.013 × 10 <sup>-6</sup>	0.7246
-100	2.038	966	0.01582	8.036 × 10 <sup>-6</sup>	1.189 × 10 <sup>-6</sup>	5.837 × 10 <sup>-6</sup>	0.7263
-50	1.582	999	0.01979	1.252 × 10 <sup>-5</sup>	1.474 × 10 <sup>-5</sup>	9.319 × 10 <sup>-6</sup>	0.7440
-40	1.514	1 002	0.02057	1.356 × 10 <sup>-5</sup>	1.527 × 10 <sup>-5</sup>	1.008 × 10 <sup>-5</sup>	0.7436
-30	1.451	1 004	0.02134	1.465 × 10 <sup>-5</sup>	1.579 × 10 <sup>-5</sup>	1.087 × 10 <sup>-5</sup>	0.7425
-20	1.394	1 005	0.02211	1.578 × 10 <sup>-5</sup>	1.630 × 10 <sup>-5</sup>	1.169 × 10 <sup>-5</sup>	0.7408
-10	1.341	1 006	0.02288	1.696 × 10 <sup>-5</sup>	1.680 × 10 <sup>-5</sup>	1.252 × 10 <sup>-5</sup>	0.7387
0	1.292	1 006	0.02364	1.818 × 10 <sup>-5</sup>	1.729 × 10 <sup>-5</sup>	1.338 × 10 <sup>-5</sup>	0.7362
5	1.269	1 006	0.02401	1.880 × 10 <sup>-5</sup>	1.754 × 10 <sup>-5</sup>	1.382 × 10 <sup>-5</sup>	0.7350
10	1.246	1 006	0.02439	1.944 × 10 <sup>-5</sup>	1.778 × 10 <sup>-5</sup>	1.426 × 10 <sup>-5</sup>	0.7336
15	1.225	1 007	0.02476	2.009 × 10 <sup>-5</sup>	1.802 × 10 <sup>-5</sup>	1.470 × 10 <sup>-5</sup>	0.7323
20	1.204	1 007	0.02514	2.074 × 10 <sup>-5</sup>	1.825 × 10 <sup>-5</sup>	1.516 × 10 <sup>-5</sup>	0.7309
25	1.184	1 007	0.02551	2.141 × 10 <sup>-5</sup>	1.849 × 10 <sup>-5</sup>	1.562 × 10 <sup>-5</sup>	0.7296
30	1.164	1 007	0.02588	2.208 × 10 <sup>-5</sup>	1.872 × 10 <sup>-5</sup>	1.608 × 10 <sup>-5</sup>	0.7282
35	1.145	1 007	0.02625	2.277 × 10 <sup>-5</sup>	1.895 × 10 <sup>-5</sup>	1.655 × 10 <sup>-5</sup>	0.7268
40	1.127	1 007	0.02662	2.346 × 10 <sup>-5</sup>	1.918 × 10 <sup>-5</sup>	1.702 × 10 <sup>-5</sup>	0.7255

El coeficiente de convección volumétrica, β, es la variación de la densidad de un fluido con la temperatura a presión constante:



$$\beta = \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_P$$

Para un gas ideal  $P = \rho \cdot R \cdot T$ , por lo que su coeficiente de expansión volumétrica a una temperatura es la inversa de dicha temperatura:

$$\beta = \frac{1}{T}$$

Solo falta por determinar el diámetro externo del sistema, el cual depende del espesor de aislante seleccionado. Sin embargo, no se conoce el espesor del segundo aislante, por lo que se procederá suponiendo un valor para el radio final con el aislante y calculando el calor cedido al entorno mediante radiación y convección. A partir del valor del flujo de calor en el sistema se podrán calcular las temperaturas de las distintas capas y el espesor de lana de vidrio para esa transferencia de calor. La solución será correcta cuando el radio de aislante calculado y el supuesto coincidan. Esta metodología de cálculo se implementará en una hoja de cálculo de Excel con el objetivo de poder variar la temperatura en la superficie o el radio supuesto y que se recalcule todo de forma casi inmediata.

A continuación, se ejemplificará el cálculo para el primer radio supuesto, que fue de 0,3 m y que sirvió para la construcción del sistema de cálculo.

El cálculo del Rayleigh (Ra) es el siguiente:

$$Ra = \frac{9,81 \cdot 0,0033 \cdot (40 - 21) \cdot (0,3 \cdot 2)^3}{2,208 \cdot 10^{-5} \cdot 1,608 \cdot 10^{-5}} = 3,736 \cdot 10^8$$

A continuación, se muestra el cálculo del Nusselt (ecuación 22):

$$Nu = \left\{ 0,6 + \frac{0,387 \cdot (3,736 \cdot 10^8)^{1/6}}{[1 + (0,599/0,7282)^{9/16}]^{8/27}} \right\}^2 = 84,506$$

Siguiendo la definición del Nusselt (ecuación 20) se calcula el coeficiente de convección externo:

$$Nu = \frac{h \cdot L}{k} ; h_{conv\_ext} = \frac{Nu \cdot k}{D_{ext}} = \frac{84,506 \cdot 0,02588}{0,3 \cdot 2} = 3,645 \text{ W/m}^2\text{K}$$

Se continúa con el cálculo de la resistencia a la convección externa:

$$R_{conv\_ext} = \frac{1}{2 \cdot \pi \cdot r \cdot h_{conv\_ext}} = \frac{1}{2 \cdot \pi \cdot 0,3 \cdot 3,645} = 0,146 \text{ m} \cdot \text{K/W}$$

Y, por último, el flujo de calor por unidad de longitud a partir de la ecuación de transferencia de calor por convección:

$$Q/L_{conv\_ext} = \frac{\Delta T}{R_{conv\_ext}} = \frac{T_s - T_\infty}{R_{conv\_ext}} = \frac{40 - 21}{0,146} = 130,543 \text{ W/m}$$

#### ● Radiación

Tras la capa de aislante de lana mineral se colocará una chapa de aluminio de poco espesor para proteger al aislante del contacto y la humedad, por lo que para el cálculo del calor cedido por radiación debe atenderse a la emisividad del aluminio que para el caso de aluminio brillante es de 0,05.

El cálculo del calor cedido por radiación es el siguiente:

$$Q/L_{radiación} = \sigma \cdot \varepsilon \cdot 2 \cdot \pi \cdot r \cdot (T_s^4 - T_\infty^4) = 5,67 \cdot 10^{-8} \cdot 0,05 \cdot \pi \cdot 0,3 \cdot (313^4 - 294^4) = 11,365 \text{ W/m}$$

El flujo de calor total por metro del reactor es la suma del cedido por radiación y el de convección:

$$Q/L = Q/L_{conv\_ext} + Q/L_{radiación} = 130,543 + 11,365 = 141,908 \text{ W/m}$$

Una vez calculado el flujo de calor ya es posible determinar el resto de temperaturas. Para obtener la temperatura de la pared interna del reactor, solo debe despejarse este parámetro de la ecuación de convección:

$$Q/L = \frac{T_0 - T_{r\ int}}{R_{cv\_int}} ; T_{r\ int} = T_0 - \frac{Q}{L} \cdot R_{cv\_int} ;$$

A continuación, se calculará la resistencia a la convección interna:

$$R_{cv\_int} = \frac{1}{2 \cdot \pi \cdot r_{int} \cdot h_{cv\_int}} = \frac{1}{\pi \cdot 0,03818 \cdot 310,15} = 0,0269 \text{ m}\cdot\text{K}/\text{W}$$

Por tanto:

$$T_{r\ int} = T_0 - \frac{Q}{L} \cdot R_{cv\_int} = 650 - 141,908 \cdot 0,0269 = 646,18 \text{ }^\circ\text{C}$$

Ahora que se conoce la temperatura de la cara interna del reactor, puede estimarse la conductividad térmica del material del mismo, la cual se calculará en una primera instancia a 646,18 °C, y, en consecuencia, será posible calcular la resistencia térmica de la conducción:

$$R_{cond\_Inconel} = \frac{\ln(r_{r\ ext}/r_{r\ int})}{2 \pi k_{Inconel}} = \frac{\ln(0,03016/0,01909)}{2 \cdot \pi \cdot 18,872} = 0,00386 \text{ m}\cdot\text{K}/\text{W}$$

Para calcular la temperatura en la cara externa de la pared del reactor se realiza lo mismo que para la cara interna, pero incluyendo la conducción a través del Inconel 625, es decir, se ajusta la ecuación 19 a los requerimientos del cálculo:

$$Q = \frac{T_0 - T_{r\ ext}}{R_{conv\_int} + R_{cond\_Inconel}} ; T_{r\ ext} = T_0 - Q \cdot (R_{conv\_int} + R_{cond\_Inconel})$$

Sustituyendo los valores conocidos:

$$T_{r\ ext} = 650 - 141,908 \cdot (0,0269 + 0,00386) = 645,63 \text{ }^\circ\text{C}$$

El incremento de temperatura es muy pequeño, por lo que no tiene sentido volver a realizar el cálculo reajustando la conductividad térmica del material.

A continuación, se muestra el cálculo de la resistencia a la conducción a través del primer aislante, cuyo espesor es de 60 mm, utilizando la conductividad de la lana mineral a 600 °C:

$$R_{cond\_LR} = \frac{\ln(r^{LR}/r_{r\ ext})}{2 \pi k_{LR}} = \frac{\ln(0,09016/0,03016)}{2 \cdot \pi \cdot 0,1561} = 1,1165 \text{ m}\cdot\text{K}/\text{W}$$

El cálculo para la temperatura al final del aislante es el siguiente:

$$Q = \frac{T_0 - T_{LR}}{R_{conv\_int} + R_{cond\_Inconel} + R_{cond\_LR}} \quad (23)$$

Despejando y calculando la temperatura en este punto:

$$T_{LR} = T_0 - Q \cdot [R_{conv\_int} + R_{cond\_Inconel} + R_{cond\_LR}]$$

$$T_{LR} = 650 - 141,908 \cdot (0,0269 + 0,00386 + 1,1165) = 487,19 \text{ } ^\circ\text{C}$$

El aislante de lana mineral se encuentra entre 645 y 487 °C, este es un rango bastante amplio, por lo que debe repetirse el cálculo para el valor de conductividad térmica correspondiente a la temperatura media de operación:

$$T_m = \frac{645,63 + 487,19}{2} = 566,11 \text{ } ^\circ\text{C}$$

A continuación se repite el cálculo para la resistencia térmica de la conducción a través del primer aislante, considerando la conductividad térmica del aislante a 566,11 °C:

$$R_{cond\_LR} = \frac{\ln(r_{LR}/r_{r\_ext})}{2 \pi k_{LR}} = \frac{\ln(0,09016/0,03016)}{2 \cdot \pi \cdot 0,1451} = 1,117 \text{ m}\cdot\text{K}/\text{W}$$

Se resuelve de nuevo la ecuación 23, pero esta vez con el nuevo valor para la resistencia a la conducción a través de lana mineral:

$$T_{LR} = 650 - 141,908 \cdot (0,0269 + 0,00386 + 1,117) = 475,15 \text{ } ^\circ\text{C}$$

Es una diferencia notable respecto al primer resultado. A pesar de que se muestre como una repetición completa del cálculo, en la hoja de cálculo de Excel simplemente se debe cambiar un valor. Esta iteración se repite varias veces hasta obtener una mínima variación de la temperatura final. A continuación, se muestra la Tabla A28 con la estructura del cálculo para la última iteración del caso en cuestión:

*Tabla A28: Cálculo de la temperatura externa del primer aislante*

Conducción Lana de Roca Section Pipe		
Conductividad	0,142686	W/m·K
Radio int	0,03016	m
Espesor	0,06	m
Radio ext	0,09016	m
Tª Reactor ext	644,37	°C
R cond LM (SP)	1,221	m·K/W
Tª Aislante 1	422,13	°C
Nueva conductividad	0,13464	W/m·K

Como se observa en la anterior Tabla A28, la temperatura entre el aislante 1 y 2 es de 472,30 °C. Esta temperatura es superior a la máxima permisible para el aislante de la lana de vidrio seleccionado, sin embargo, este valor de temperatura no es definitivo, ya que aún no se ha comprobado si el radio de aislante supuesto coincide con el calculado.

A continuación, se muestra la ecuación 24, correspondiente a la transferencia de calor a través del segundo aislante:

$$Q = \frac{T_{LR} - T_{LV}}{R_{\text{cond\_LV}}} \quad (24)$$

A partir de la ecuación 24 se obtiene el valor de la resistencia a la conducción:

$$R_{\text{cond\_LV}} = \frac{T_{LR} - T_{LV}}{Q} = \frac{472,30 - 40}{141,908} = 3,046 \text{ m}\cdot\text{K}/\text{W}$$

Y a partir del concepto de resistencia térmica a la conducción, se despeja el radio externo:

$$R_{\text{cond\_LV}} = \frac{\ln(r_{LV}/r_{LR})}{2 \pi k_{LV}} ;$$

$$r_{LV} = r_{LR} \cdot e^{R_{\text{cond\_LV}} 2 \pi k_{LV}} \quad (25)$$

Para la segunda capa de aislante, sí puede calcularse la temperatura de servicio media, puesto que la  $T_s$  se fijó en 40 °C:

$$T_m = \frac{472,30 + 40}{2} = 256,15 \text{ }^\circ\text{C}$$

Esta será la temperatura a la que se evalúe la conductividad térmica de la lana de vidrio.

A continuación, se muestra la resolución de la ecuación 25:

$$r_{LV} = r_{LR} \cdot e^{R_{\text{cond\_LV}} 2 \pi k_{LV}} = 0,09016 \cdot e^{3,046 \cdot 2 \cdot \pi \cdot 0,0811} = 0,4254 \text{ m}$$

El radio supuesto, que fue de 0,3 m, se aleja bastante del calculado, por lo que será necesario suponer un nuevo radio y repetir el cálculo. Sin embargo, el método iterativo se vuelve bastante cómodo gracias a la hoja de cálculo implementada y se llega a la convergencia para un radio de 0,332 m. A pesar del cálculo se debe tener en cuenta que el radio calculado no es más que un valor orientativo, ya que los espesores de aislante comercial se encuentran ya fijados. Por tanto, el cálculo del aislante necesario sirve para tomar una decisión entre elegir un espesor u otro. Los resultados más destacados se muestran a continuación.

*Tabla A29: Resultados del cálculo del espesor de aislante para 40 °C de  $T_s$*

Resultados del cálculo del espesor de aislante		
Tª Fluido	650	°C
Tª Pared reactor int	645,80	°C
Tª Pared reactor ext	645,20	°C
Tª Aislante 1	454,29	°C
Tª Aislante 2	40	°C
Espesor Aislante 1	0,06	m
Espesor Aislante 2	0,242	m
Radio ext	0,332	m
Flujo de calor	156,292	W/m

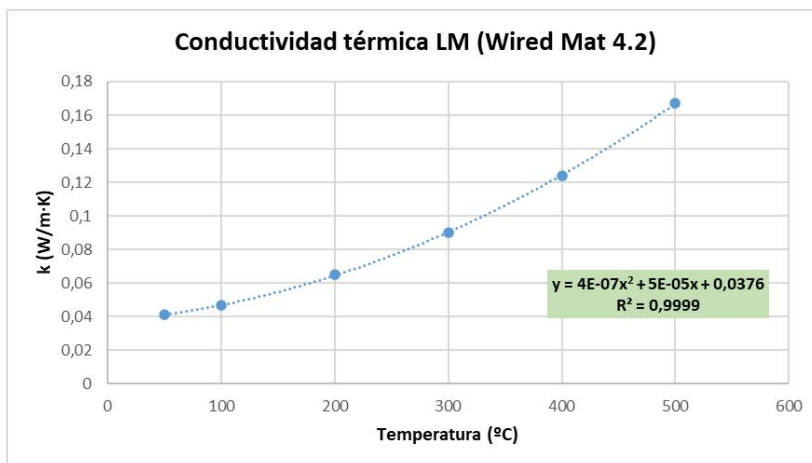
El problema de los resultados obtenidos es la temperatura entre los aislantes que es de 454,29 °C mientras que el aislante de lana de vidrio seleccionado tiene una temperatura máxima de exposición superficial de 400 °C, por lo que no puede usarse en las condiciones mencionadas. En su lugar, se utilizará otro aislante de lana mineral, puesto que este material, a pesar de ser algo más caro que la lana de vidrio, presenta un mejor comportamiento en rangos extremos de temperatura y su conductividad térmica es aún más baja.

Atendiendo nuevamente al catálogo de la empresa “ISOVER” se observan múltiples posibilidades fabricadas en lana mineral para tuberías industriales que se diferencian en su conductividad (sobre todo a temperaturas elevadas) y en la temperatura máxima de exposición. De entre las mismas se seleccionará el aislante TECH Wired Mat MT 4.2 que presenta una temperatura máxima de exposición de 600 °C. A continuación, se muestra la Tabla A30 con la conductividad térmica de dicho aislante:

*Tabla A30: Conductividad térmica de la lana mineral Wired Mat, ISOVER [26]*

$\lambda$	Conductividad térmica							
	Temp.* (°C)	50	100	200	300	400	500	600
	$\lambda$ (W/m·K)	0,041	0,047	0,065	0,090	0,124	0,167	0,217

A continuación, se muestra en la Figura A40 la evolución de la conductividad térmica de la lana de roca seleccionada (Wired Mat 4.2) con la temperatura:



*Figura A40: Evolución de la conductividad térmica de la lana mineral (Wired Mat 4.2) con la temperatura*

Ambas variables se relacionan mediante la siguiente expresión:

$$k = 4,1402 \cdot 10^{-7} \cdot T^2 + 5,1201 \cdot 10^{-5} \cdot T + 0,037649$$

$$\text{Siendo } R^2 = 0,9999$$

A continuación, se muestra la Tabla A31 con el resultado del cálculo del radio de aislante necesario para obtener una temperatura superficial en el sistema de 40 °C utilizando lana mineral Wired Mat 4.2:

*Tabla A31: Resultados del cálculo del espesor de aislante Wired Mat 4.2 para 40 °C de Ts*

Resultados del cálculo del espesor de aislante		
Tª Fluido	650	°C
Tª Pared reactor int	645,85	°C
Tª Pared reactor ext	645,27	°C
Tª Aislante 1	453,96	°C
Tª Aislante 2	40	°C
Espesor Aislante 1	0,06	m
Espesor Aislante 2	0,235	m
Radio ext	0,326	m
Flujo de calor	153,011	W/m

Cabe mencionar que los resultados obtenidos son muy similares a los del aislante anterior, con la diferencia de que el nuevo aislante sí soporta las condiciones de exposición.

El siguiente paso es estudiar la temperatura superficial al utilizar los espesores comerciales del aislante seleccionado. A continuación, se muestra la Tabla A32 con los espesores comercializados para el aislante TECH Wired Mat 4.2:

*Tabla A32: Dimensiones comercializadas para la lana mineral Wired Mat 4.2\*, ISOVER*

Titulo	Largo	Ancho	Espesor
TECH WIRED MAT 4.2	6	1	40
TECH WIRED MAT 4.2	5	1	50
TECH WIRED MAT 4.2	5	1	60
TECH WIRED MAT 4.2	4,5	1	70
TECH WIRED MAT 4.2	3	1	80
TECH WIRED MAT 4.2	3	1	100
TECH WIRED MAT 4.2	2,5	1	120

*\*El valor del espesor se encuentra en mm*

Como se muestra en la Tabla A31, un espesor del segundo aislante de 0,238 m implica una temperatura en la superficie del aislante de 40 °C. Por tanto, tiene sentido estudiar espesores con valores similares al anterior. En teoría podría colocarse cualquier espesor mediante la combinación de

capas de distinto espesor, pero, con el objetivo de facilitar la instalación y el posible recambio, se estudiarán solo aquellas soluciones posibles con rollos de un solo tipo.

El cálculo se realizará mediante la función “Buscar objetivo” en Excel, siendo dicho objetivo que el radio del segundo aislante sea igual al radio supuesto (radio del primer aislante más el espesor deseado) siendo la variable a modificar la temperatura superficial. A continuación, se presenta la Tabla A33 con el cálculo de la temperatura superficial al colocar dos vueltas del aislante mencionado para los 4 espesores más grandes comercializados:

*Tabla A33: Resultados de las temperaturas del reactor para distintos espesores de Wired Mat 4.2*

Estudio de distintos espesores de TECH Wired Mat 4.2					
Espesor (mm)	Radio ext (m)	Flujo de calor (W/m)	T <sup>a</sup> Aislante 1 (°C)	T <sup>a</sup> Superficial (°C)	Diámetro total (m)
70	0,230	181,94	422,17	48,99	0,460
80	0,250	174,44	431,57	46,49	0,500
100	0,290	162,45	446,58	42,64	0,580
120	0,330	153,76	457,47	39,86	0,660

El objetivo inicial era calcular el espesor de aislante necesario para que la temperatura superficial de dicho aislante fuese de 40 °C a pesar de que la legislación habla de una temperatura máxima de 60 °C. El objetivo de esta decisión era el de minimizar las pérdidas energéticas y poder suponer que el reactor trabaja de forma adiabática. Sin embargo, como se indicó en el Anexo 3, a la hora de definir la entalpía de reacción, esta se sobrestimó para cumplir con esta suposición, es decir, se consideró que la reacción es algo más endotérmica de lo que es realmente (no existe ningún valor en bibliografía de su valor exacto) para considerar estas pérdidas energéticas.

En la anterior Tabla A33 se muestra que el aislante de 70 mm de espesor permite reducir 0,2 m el diámetro total y la temperatura superficial sigue estando por debajo de los 50 °C, por lo que las pérdidas energéticas seguirán siendo bastante bajas y se reducirá bastante el coste de aislar térmicamente el reactor al utilizar un espesor de casi la mitad.

Por tanto, el reactor se aislará con una primera capa de lana mineral en forma de “section pipe” de 60 mm que se ajustará a la perfección al reactor, disminuyendo la probabilidad de formación de puentes térmicos, seguida de dos capas de 70 mm de lana mineral y por último una capa de aluminio fina para evitar el deterioro del aislante. El diámetro total de la tubería más el aislante será, como se muestra en la Tabla A33, de 0,46 m.

## **5. INTERCAMBIADOR DE CALOR**

En el presente anexo se desarrollan los cálculos que permitan dimensionar el intercambiador de calor y el aislamiento térmico del mismo para que se pueda aprovechar el calor del efluente del reactor para precalentar la corriente de alimentación, además de refrigerar la corriente que abandona el reactor. El objetivo del intercambiador de calor, que actúa como economizador, es reducir los costes energéticos asociados al calentamiento de la alimentación y la refrigeración del efluente del reactor.

### **5.1 DISEÑO DEL INTERCAMBIADOR DE CALOR**

Un intercambiador de calor es un equipo que permite la transferencia de calor entre dos fluidos sin que se produzca la mezcla de los mismos. Existen multitud de intercambiadores de calor y disposiciones de los mismos, pero por las condiciones de presión a las que se someterá este, el más adecuado es el de tubos concéntricos o doble tubo. No es el tipo de intercambiador que ofrece la mayor área de transferencia, pero permite trabajar con fluidos a presiones de cientos de bar, cosa que no sería posible en intercambiadores de placas o de carcasa y tubos.

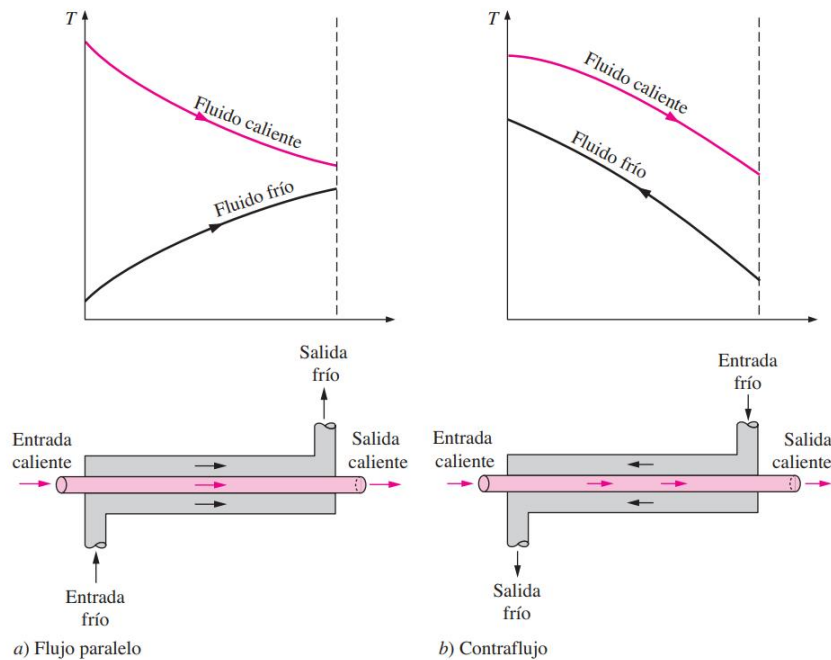
El objetivo del cálculo a realizar es la determinación de la razón de transferencia de calor y las temperaturas de salida de los fluidos caliente y frío para valores definidos de flujo másico y temperaturas de entrada de los fluidos para un tamaño de intercambiador dado. Se estudiará cómo afecta el tamaño del intercambiador a la transferencia de calor y la temperatura de los fluidos que abandonan el mismo.

En un intercambiador de tubos concéntricos, uno de los fluidos pasa por el tubo interno, que es el más pequeño, en tanto que el otro lo hace por el espacio anular entre los dos tubos. En un intercambiador de calor de doble tubo son posibles dos tipos de disposición del flujo: en el flujo paralelo los dos fluidos, el frío y el caliente, entran en el intercambiador por el mismo extremo y se mueven en la misma dirección. Por otra parte, en el flujo en contracorriente los fluidos entran en el intercambiador por los extremos opuestos y fluyen en direcciones opuestas.

A continuación, se muestra la Figura A41 con la comparación de la evolución de la temperatura de ambas corrientes en un intercambiador de tubos concéntricos según la disposición de flujo:



*Diseño de un reactor para la gasificación en agua supercrítica de subproductos del reciclado de fibras de carbono de la industria aeronáutica*



*Figura A41: Comparación del resultado de un intercambiador de tubos concéntricos según la disposición de flujo, Cengel*

La ecuación de diseño para un intercambiador de calor es la siguiente:

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{ml} \tag{26}$$

Siendo:

$$\Delta T_{ml} = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln(\Delta T_1 / \Delta T_2)} \tag{27}$$

En cuanto a la disposición de flujo, con un IC en paralelo, la temperatura máxima a la que el fluido frío puede abandonar el equipo es a la temperatura a la que sale el fluido caliente. Sin embargo, para el caso de un intercambiador con una disposición en contracorriente, la temperatura de salida del fluido frío puede ser mayor que la del fluido caliente, aunque, evidentemente, menor que la de entrada del caliente. Además, otra ventaja de la disposición en contraflujo es que el  $\Delta T_{ml}$  siempre será mayor que la que presentaría el intercambiador trabajando en paralelo y, por ende, se necesita una menor área de intercambio para lograr una misma razón de transferencia de calor.

Suponiendo que la superficie exterior del intercambiador de calor está perfectamente aislada, hasta el punto de que no existe pérdida de calor hacia el medio circundante y cualquier transferencia de calor ocurre únicamente entre los dos fluidos, la primera ley de la termodinámica requiere que el calor cedido desde el fluido caliente, sea igual al calor ganado por el fluido frío, es decir:

$$\dot{Q} = m_c \cdot c_{pc} \cdot (T_{c,ent} - T_{c,sal}) \tag{28}$$

$$\dot{Q} = m_f \cdot c_{pf} \cdot (T_{f, sal} - T_{f, ent}) \quad (29)$$

De forma simplificada se presenta un sistema de 3 ecuaciones con 4 incógnitas, puesto que no se conocen las temperaturas de salida de ambas corrientes, el coeficiente global de transmisión de calor y el área de intercambio que es el objetivo del cálculo. Por tanto, existe un grado de libertad y el procedimiento de cálculo más intuitivo sería el siguiente:

1. Suponer una temperatura de salida para el fluido caliente.
2. Calcular el calor que debe ceder la corriente caliente para abandonar el intercambiador a esa temperatura (ecuación 28).
3. Calcular la temperatura de salida del fluido frío a partir del calor ganado por la corriente fría, que es igual al cedido por la caliente (ecuación 29).
4. Calcular el incremento de temperatura media logarítmica (ecuación 27).
5. Determinar los coeficientes de convección de la cara interna y externa de la pared de intercambio.
6. Determinar la conductividad térmica del Inconel 625 en las condiciones de operación.
7. Calcular la resistencia térmica total.
8. Determinar el coeficiente global de transferencia de calor.
9. Calcular el área de intercambio necesario para que se produzca la transferencia de calor supuesta.
10. Calcular la longitud del intercambiador de calor diseñado.

Estos 10 pasos deben realizarse para cada temperatura de salida del fluido caliente que pretenda estudiarse. En el caso en cuestión, en el que el objetivo es obtener una curva que relacione el calor intercambiado entre los fluidos y la longitud del intercambiador requerida para ello, cuanto mayor sea el número de puntos estudiados, más representativa será dicha curva. Para ello, se implementará una hoja de cálculo en Excel.

Antes de estudiar cualquier temperatura de salida es importante definir la disposición de flujo y por dónde avanzará cada fluido. Una disposición de flujo en paralelo no tendría sentido, ya que la temperatura de salida del caliente será superior a la del frío, de forma que la corriente caliente que abandona el intercambiador aún sería capaz de ceder bastante calor a otra corriente o a su entorno. Por tanto, lo más sensato es que el intercambiador trabaje en contracorriente. En el intercambiador de tubos concéntricos que se pretende diseñar, evidentemente, el fluido caliente avanzará por el tubo interior y el frío por el exterior para que todo el calor que ceda la corriente caliente sea transferido a la fría.

Solo falta fijar el diámetro de los tubos interior y exterior que conforman el intercambiador de calor. Uno de los tubos será, en principio, igual que el del reactor, es decir, 2" XXS y el otro debe ser de menor calibre, ya que en las especificaciones de diseño se fijó el anterior diámetro nominal como el

máximo en los equipos de la planta que funcionasen a altas presiones. Quizás el tubo exterior podría ser de un menor espesor, pero no se ha encontrado normativa referente al cálculo del necesario para coronas circulares. Además, este espesor permitiría que aun dándose la rotura del tubo interior, el exterior permaneciese en condiciones seguras, disminuyendo los potenciales accidentes en el funcionamiento de la planta.

Para la selección del tubo interior se mostrará, de nuevo, la Tabla A16 con los diámetros comerciales y espesores de tubos de Inconel 625 comercializados por la empresa “TUBINOX”:

*Tabla A16: Dimensiones y pesos de los tubos según normas ASME B36.10 y B36.19\**

NPS	OD mm.	5S	10S	10	20	30	Std. 40S	40	60	XS 80S	80	100	120	140	160	XXS
1/8"	10,29		1,24 0,28				1,73 0,37	1,73 0,37		2,41 0,47	2,41 0,47					
1/4"	13,72		1,65 0,49				2,24 0,64	2,24 0,64		3,02 0,82	3,02 0,82					
3/8"	17,15		1,65 0,63				2,31 0,87	2,31 0,87		3,20 1,12	3,20 1,12					
1/2"	21,3	1,65 0,81	2,11 1,02	2,11 1,02			2,77 1,29	2,77 1,29		3,73 1,64	3,73 1,64				4,75 1,97	7,47 2,59
3/4"	26,7	1,65 1,03	2,11 1,30	2,11 1,30			2,87 1,71	2,87 1,71		3,91 2,23	3,91 2,23				5,54 2,93	7,82 3,69
1"	33,4	1,65 1,31	2,77 2,13	2,77 2,13			3,38 2,54	3,38 2,54		4,55 3,29	4,55 3,29				6,35 4,30	9,09 5,53
1 1/4"	42,2	1,65 1,67	2,77 2,73	2,77 2,73			3,56 3,44	3,56 3,44		4,85 4,53	4,85 4,53				6,35 5,69	9,70 7,88
1 1/2"	48,3	1,65 1,93	2,77 3,16	2,77 3,16			3,68 4,11	3,68 4,11		5,08 5,49	5,08 5,49				7,14 7,35	10,16 9,69
2"	60,3	1,65 2,42	2,77 3,99	2,77 3,99			3,91 5,52	3,91 5,52		5,54 7,60	5,54 7,60				8,71 11,26	11,07 13,65

\*Los valores negros corresponden al espesor en milímetros y los rojos al peso en kilogramos por metro.

El diámetro interior del tubo exterior es de 38,18 mm, por lo que el tubo interior debe contar con un diámetro menor que este valor. Idealmente, no necesitaría contar con un gran espesor, ya que la presión interna es igual a la externa y no actuaría fuerza alguna sobre la pared del tubo interior más allá del rozamiento de los fluidos. Sin embargo, en el funcionamiento real la presión en el interior será ligeramente menor debido a la pérdida de carga y, en distintas situaciones como son el arranque y la parada de la planta, sí existirán grandes variaciones de la presión interna y externa del tubo. Por tanto, para asegurar la integridad del tubo interior antes estas situaciones y posibles fallos en la operación, se impondrá un espesor capaz de soportar la presión de diseño (un 12,5% más que la de operación) tanto interna como externa. En la Tabla A16 se observa que para el tubo exterior seleccionado son posibles soluciones como tubo interior aquellos con un diámetro nominal de 1/2, 3/4 y 1". Primeramente, se realizará el estudio con el tubo de 1" XXS y luego se estudiarán las otras opciones.

En el presente documento se definirán los diámetros interno y externo del tubo interior como  $d_i$  y  $d_e$  respectivamente. Asimismo, los de la conducción exterior serán  $D_i$  y  $D_e$ .

Como se indicó anteriormente, se ha implementado una hoja de cálculo en Excel para el cálculo de la longitud del intercambiador de calor necesario en función de la temperatura de salida del fluido caliente. A continuación, se ejemplificará el cálculo de la longitud necesaria para que la corriente caliente abandone el intercambiador a 100 °C.

Para calcular el calor que debe ceder la corriente caliente para pasar de 630 °C a 100 °C se atenderá a la capacidad calorífica de dicha corriente. La corriente de productos (corriente caliente) está formada por agua, el fenol sin reaccionar y los productos gaseosos. Se conoce el caudal molar de cada una de las especies que conforman dicha corriente, por lo que calcular la capacidad calorífica de la corriente global no es más que realizar la media ponderada de los Cp de las distintas especies involucradas. El problema reside en que la variación de temperatura entre entrada y salida es muy grande y el Cp es una propiedad que depende en gran medida de la temperatura, más si cabe para el caso del agua que pasa por el punto crítico (punto en el que el Cp del agua se hace infinito). Por tanto, para que el cálculo tenga sentido debe realizarse en pequeños incrementos de temperatura o, lo que es lo mismo, integrar la ecuación de la curva del Cp respecto a la temperatura. Sin embargo, dicha curva para el agua no es fácil de identificar con una función matemática en un rango tan amplio de temperatura (el punto crítico lo hace imposible), por lo que la resolución de dicha integral de forma numérica (sumatorio de pequeños incrementos) es la solución más viable.

El cálculo se ha efectuado en una hoja de cálculo en Excel, lo que lo hace mucho menos laborioso, se ha calculado el calor que cede la corriente al descender su temperatura un grado Celsius a una temperatura dada (ecuación 30), y se ha hecho el sumatorio para todas las temperaturas desde 630 °C a 100 °C.

$$C = \overline{C_p} \cdot W_m \tag{30}$$

En la Tabla A34 se resume la composición del caudal de productos:

*Tabla A34: Caudales máxicos de las distintas especies en la corriente de productos*

Caudal de productos (g/s)					
H <sub>2</sub> O	C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> OH	H <sub>2</sub>	CH <sub>4</sub>	CO	CO <sub>2</sub>
41,645	0,016	0,044	0,282	0,258	1,019

Es importante aclarar que, como se indicó en el Anexo 1, no se han encontrado fuentes fiables para las propiedades del fenol en el rango de operación, por lo que el caudal máxico correspondiente al fenol se considerará como agua. Además, en la anterior Tabla A34 se observa que el caudal de fenol es despreciable en comparación con el resto de especies, más aún si se comparan los caudales molares.

El cálculo del calor que cede la corriente a una temperatura dada para descender un grado Celsius se calcularía de la siguiente forma:

$$C = C_{p_{H_2O}} \cdot (W_{m_{H_2O}} + W_{m_{C_6H_5OH}}) + C_{p_{H_2}} \cdot W_{m_{H_2}} + C_{p_{CH_4}} \cdot W_{m_{CH_4}} + C_{p_{CO}} \cdot W_{m_{CO}} + C_{p_{CO_2}} \cdot W_{m_{CO_2}}$$

Por tanto, a 630 °C:

$$C = 2,865 \cdot (41,65 + 0,016) + 14,893 \cdot 0,044 + 4,369 \cdot 0,2819 + 1,181 \cdot 0,258 + 1,269 \cdot 1,019$$

$$C = 134,519 \text{ W/}^\circ\text{C} = 0,1345 \text{ kW/}^\circ\text{C}$$

Este cálculo debe repetirse para cada temperatura en estudio y luego se realiza el sumatorio de todas. En el presente documento se conocerá a este calor para el descenso de un grado como capacitancia a cierta temperatura, en este caso, 630 °C. Para el caso estudiado de un descenso de la temperatura de la corriente de salida hasta los 100 °C, el calor cedido sería de 132,802 kW.

El siguiente paso sería calcular la temperatura de salida del fluido frío a partir del calor cedido por la corriente caliente, esto se realizaría a partir de la ecuación 29, pero, con la corriente fría existe el mismo problema que con la corriente caliente, es decir, el Cp varía mucho en el rango estudiado, por lo que el cálculo debe realizarse con pequeños incrementos de temperatura. Este problema se resolvió calculando el calor que debería ganar dicha corriente fría para abandonar el intercambiador a cierta temperatura. Se procedió con este cálculo para todos los incrementos de un grado Celsius entre 25 y 630 °C, ya que, al estar realizado en una hoja de cálculo en Excel, la diferencia está en el número de casillas que se suman para cada temperatura.

Una vez realizado este cálculo, se busca el valor de 132,802 kW en la columna de calor ganado por la corriente fría para obtener la temperatura a la que la corriente fría debe abandonar el intercambiador. En el caso de la hoja Excel, en la que el objetivo era realizar el cálculo para todas las temperaturas, sería demasiado tedioso buscar cada una de ellas manualmente, por lo que se utilizó la función “Buscar”. Es totalmente improbable que coincidan a la perfección el calor ganado y el cedido para que las corrientes salgan a temperaturas enteras (números enteros), por lo que se recurrió a buscar el calor cedido redondeado hacia arriba a un decimal y también hacia abajo y se realizó la media de ambos valores. De esta forma el calor cedido y ganado por las dos corrientes era más parecido. En general, era una buena aproximación, sin embargo, esta solución generaba el problema de que para dos temperaturas diferentes de salida del fluido caliente, se podía obtener la misma temperatura de salida del fluido frío, además de ser bastante menos precisa en las inmediaciones del punto crítico del agua. Esto se solucionó de una forma bastante sencilla. A partir de la temperatura de salida del fluido frío aproximada, se conocía el calor ganado por la corriente fría aproximado, por lo que atendiendo a la combinación de las ecuaciones 29 y 30 se obtiene que el calor transferido es igual a la capacitancia por el incremento de temperatura:

$$\dot{Q} = C \cdot \Delta T$$

Siendo

-Q: Diferencia entre el calor real cedido por la corriente caliente y el calor aproximado ganado por la fría.

-C: Capacitancia térmica a la temperatura aproximada de salida de la corriente fría.

-\Delta T: Diferencia entre la temperatura de salida de la corriente fría aproximada y real.

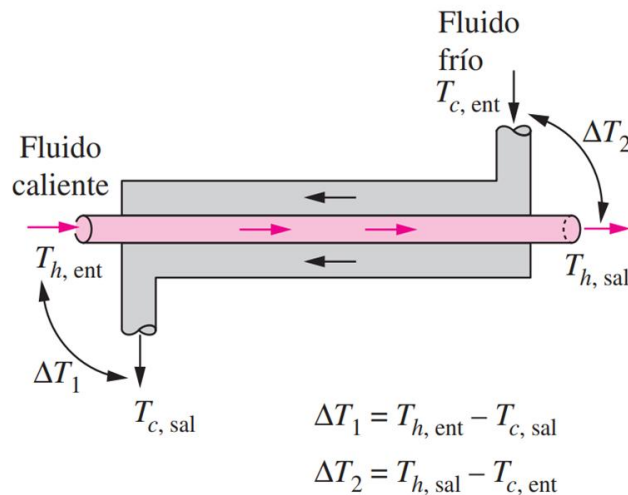
Para el caso en el que la corriente caliente abandona el intercambiador a 100 °C, la temperatura aproximada de salida del fluido frío es de 508 °C, la cual se corresponde con 132,77 kW ganados por la corriente fría. En este caso la aproximación ya ofrecía un valor bastante bueno, pero se seguirá ejemplificando el proceso de cálculo completo con este valor.

El cálculo de la diferencia entre la temperatura aproximada de salida del fluido frío y la real es el siguiente:

$$\Delta T = \frac{\dot{Q}}{C(508^\circ\text{C})} = \frac{132,802 - 132,77}{0,158} = 0,21^\circ\text{C}$$

Por tanto, la corriente fría abandona el intercambiador de calor a 508,21 °C.

El siguiente paso es calcular el incremento de temperatura media logarítmica,  $\Delta T_{ml}$ , mediante la ecuación 27 y la Figura A42, en la que se muestra a qué corresponden  $\Delta T_1$  y  $\Delta T_2$ :



*Figura A42: Disposición de flujo de un intercambiador de calor de tubos concéntricos en contracorriente, Cengel*

$$\Delta T_{ml} = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln(\Delta T_1 / \Delta T_2)} = \frac{(630 - 508,21) - (100 - 25)}{\ln\left(\frac{630 - 508,21}{100 - 25}\right)} = 96,51^\circ\text{C}$$

El siguiente paso es calcular los coeficientes convección en el interior del primer tubo y del segundo. Este cálculo se realizó de forma idéntica al del coeficiente de convección interna en el Anexo 4 para el cálculo del espesor de aislante necesario. Se muestra, a continuación, la ecuación 20 en la que se basa dicho cálculo:

$$Nu = \frac{h \cdot L}{k} \quad (20)$$

Una vez que se haya obtenido el Nusselt, se despeja de la anterior ecuación 20 el valor de h. A continuación, se muestra la Tabla A22, correspondiente a la expresión para el cálculo del Nusselt para convección interna en tuberías cilíndricas:

*Tabla A22: Ecuación de cálculo de Nu para tuberías cilíndricas, Cengel*

ECUACIÓN	CONDICIONES
$Nu = 4,36$	Laminar, Desarrollado, flujo de calor constante
$Nu = 3,66$	Laminar, Desarrollado, Temperatura superficial constante
$Nu = 3,66 + \frac{0,065 \cdot (D/L) \cdot Re \cdot Pr}{1 + 0,04 \cdot [(D/L) \cdot Re \cdot Pr]^{2/3}}$	Laminar, Longitud de entrada térmica, Temperatura superficial constante
$Nu = 1,86 \cdot \left(\frac{Re \cdot Pr}{L/D}\right)^{1/3} \cdot \left(\frac{\mu}{\mu_s}\right)^{0,14}$	Laminar, Longitud de entrada combinada, Temperatura superficial constante
$Nu = 0,023 \cdot Re^{0,8} \cdot Pr^n$	Turbulento, Completamente desarrollado. n= 0,4 calentamiento n= 0,3 enfriamiento

Como se observa en la anterior Tabla A22, la ecuación para el cálculo del Nusselt varía según el régimen de flujo, es necesario calcular, por tanto, el valor de Re para seleccionar la ecuación adecuada. El caudal se obtendrá a partir del caudal molar y la densidad molar y la densidad a partir de la masa molar y la densidad molar, todo con la media ponderada de las propiedades de las distintas especies químicas que conforman la corriente de productos. Además, las propiedades se evalúan a la temperatura media de la corriente, es decir, la media entre la temperatura de entrada y de salida de la corriente:

$$T_m = \frac{630 + 100}{2} = 365 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$Re = \frac{4 \cdot Q \cdot \rho}{\pi \cdot d_i \cdot \mu} = \frac{4 \cdot \frac{2,386 \text{ mol/s}}{1000 \cdot 30,488 \text{ mol/L}} \cdot 18,67 \text{ g/mol} \cdot 30,488 \text{ mol/L}}{\pi \cdot 0,0152 \text{ m} \cdot 6,41 \cdot 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}} = 58102$$

Es un régimen turbulento, por lo que debe usarse la expresión de la última fila de la Tabla A22 con  $n=0,3$ , ya que dicha corriente se enfría (ecuación 21):

$$Nu = 0,023 \cdot Re^{0,8} \cdot Pr^{0,3} \tag{21}$$

Para poder aplicarla solo falta realizar el cálculo del Prandtl:

$$Pr = \frac{\mu \cdot C_p}{k} = \frac{6,41 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s} \cdot 8766 \text{ J/kg} \cdot \text{K}}{0,436 \text{ W/m} \cdot \text{K}} = 1,289$$

De esta forma:

$$Nu = 0,023 \cdot 58102^{0,8} \cdot 1,289^{0,3} = 160,752$$

Y de la ecuación 20 se obtiene el coeficiente de convección interno del tubo interior:

$$h_i = \frac{Nu \cdot k}{d_i} = \frac{160,752 \cdot 0,436}{0,01522} = 4605 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$$

El coeficiente de convección “externo” se calcula de la misma forma que el caso anterior, pero con las propiedades de la corriente de alimentación, las cuales se aproximarán a las del agua, ya que no existen fuentes fiables para la obtención de las del fenol y la proporción del mismo en la corriente es bastante pequeña. Asimismo, es importante tener en cuenta que no se trata de un tubo completo sino de una corona circular, de forma que la parte central del mismo está ocupada por la conducción interior. Para el correcto cálculo se define, por tanto, el diámetro hidráulico de la tubería externa:

$$D_H = 4 \cdot \frac{\text{Sección de paso}}{\text{Perímetro mojado}} = 4 \cdot \frac{\frac{1}{4}(\pi \cdot D_i^2 - \pi \cdot d_e^2)}{\pi \cdot D_i + \pi \cdot d_e}$$

$$D_H = \frac{D_i^2 - d_e^2}{D_i + d_e} = \frac{(D_i + d_e) \cdot (D_i - d_e)}{D_i + d_e} = D_i - d_e$$

El diámetro hidráulico para una corona circular se corresponde con la diferencia entre el diámetro interno del tubo exterior y el externo del tubo interior, en este caso:

$$D_H = 0,03818 - 0,0334 = 0,00478 \text{ m}$$

La temperatura a la que deben evaluarse las propiedades de la corriente, temperatura media entre la de entrada y salida de la corriente fría en el intercambiador, es la siguiente:

$$T_m = \frac{25 + 508,21}{2} = 266,6 \text{ }^\circ\text{C}$$

Como no es un número entero se utilizarán los valores medios entre las propiedades del agua a 266 y 267 °C a 25 MPa.

A continuación, se muestra el cálculo de los números adimensionales Re y Pr:

$$Re = \frac{4 \cdot Q \cdot \rho}{\pi \cdot D_H \cdot \mu} = \frac{4 \cdot \frac{2,231 \text{ mol/s}}{1000 \cdot 44,277 \text{ mol/L}} \cdot 19,41 \text{ g/mol} \cdot 44,277 \text{ mol/L}}{\pi \cdot 0,00478 \text{ m} \cdot 1,047 \cdot 10^{-4} \text{ Pa} \cdot \text{s}} = 110169$$



$$Pr = \frac{\mu \cdot C_p}{k} = \frac{1,047 \cdot 10^{-4} \text{ Pa}\cdot\text{s} \cdot 4772 \text{ J/kg}\cdot\text{K}}{0,622 \text{ W/m}\cdot\text{K}} = 0,805$$

En este caso también debe usarse la ecuación de la última fila de la Tabla A22 (ecuación 21) pero cambiando el valor de “n” por 0,4, ya que se trata de un fluido que se calienta:

$$Nu = 0,023 \cdot 110169^{0,8} \cdot 0,805^{0,4} = 227,87$$

Y de la ecuación 20 se obtiene el coeficiente de convección interno del tubo exterior:

$$h_e = \frac{Nu \cdot k}{D_H} = \frac{227,87 \cdot 0,622}{0,00478} = 29652 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$$

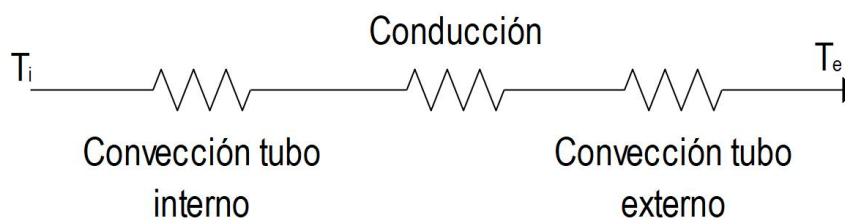
Una vez calculados los coeficientes de convección, el siguiente punto en la lista es determinar la conductividad térmica del Inconel 625 en las condiciones de operación. Al igual que para la estimación de las propiedades de las corrientes, la conductividad térmica del Inconel 625 se tomará a la temperatura media entre la salida y la entrada de las corrientes. Se hará la media de la entrada y la salida de la corriente caliente porque esta experimenta una mayor variación de su temperatura y porque todo el calor que cede este fluido debe pasar a través de dicho material.

En el Anexo 4 “Cálculo del aislante” se realizó una regresión lineal a la representación de la conductividad térmica del material frente a la temperatura y se obtuvo la siguiente expresión:

$$k = 0,0147 \cdot T + 9,4862$$

Usando esta expresión para una temperatura de 365 °C se obtiene un valor de conductividad de 14,852 W/m·K.

El siguiente paso es obtener la resistencia térmica global, la cual es, como se observa en la siguiente Figura A43, una combinación de 3 resistencias en serie:



*Figura A43: Esquema del circuito eléctrico equivalente*

La resistencia térmica total se calculará a partir de la siguiente expresión (ecuación 31):

$$\frac{1}{R_{\text{Total}}} = \frac{1}{\pi d_i h_i} + \frac{\ln\left(\frac{d_e}{d_i}\right)}{2 \pi k_{\text{Inconel}}} + \frac{1}{\pi D_H h_e} \tag{31}$$

A continuación, se muestra dicho cálculo para el caso ejemplificado:

$$\frac{1}{R_{\text{Total}}} = \frac{1}{\pi \cdot 0,01522 \cdot 4605} + \frac{\ln\left(\frac{0,0334}{0,01522}\right)}{2 \pi \cdot 14,852} + \frac{1}{\pi \cdot 0,00478 \cdot 29652} = 0,0152 \text{ m}\cdot\text{K}/\text{W}$$

El siguiente paso es calcular el coeficiente global de transferencia de calor a partir de la definición de resistencia global:

$$U_i = \frac{1}{R_{\text{Total}} \cdot d_i \cdot \pi} = \frac{1}{0,0152 \cdot 0,01522 \cdot \pi} = 1375,92 \text{ W}/\text{m}^2 \cdot \text{K}$$

Por medio de la ecuación 26 es posible obtener el área interna para que se lleve a cabo la transferencia de calor estudiada:

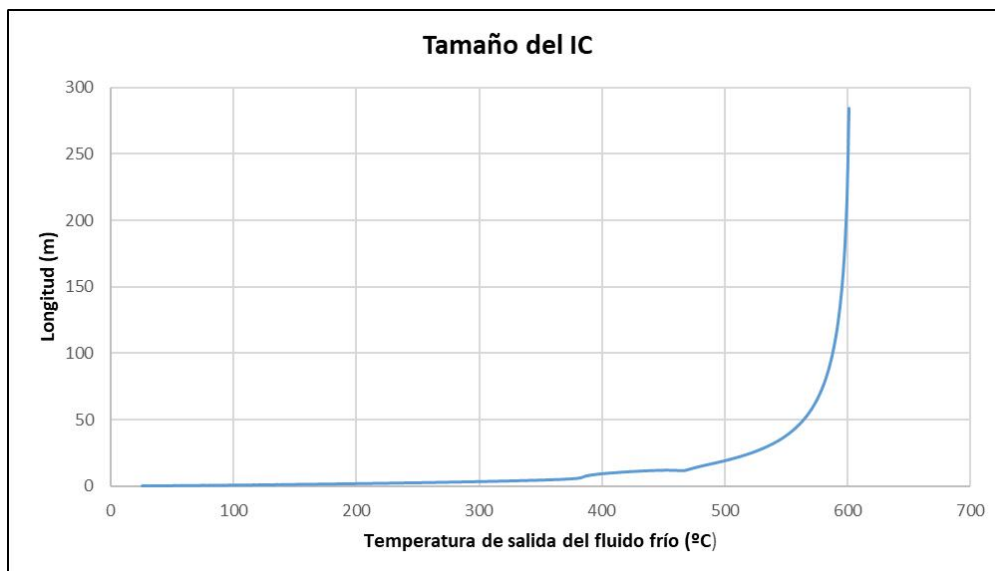
$$A_i = \frac{Q}{U_i \cdot \Delta T_{\text{ml}}} = \frac{132,802 \text{ kW} \cdot 1000}{1375,92 \text{ W}/\text{m}^2 \cdot \text{K} \cdot 96,51 \text{ K}} = 1,001 \text{ m}^2$$

Por último, restaría el cálculo de la longitud necesaria para que el intercambiador de calor cuente con esa área en la cara interna del tubo interior.

$$L = \frac{A_i}{\pi \cdot d_i} = \frac{1,001}{\pi \cdot 0,01522} = 20,93 \text{ m}$$

Es decir, sería necesario un intercambiador de calor con las dimensiones interiores previamente definidas (2" XXS y 1" XXS) de 21 metros de largo para que la corriente caliente abandone dicho intercambiador a 100 °C.

A continuación, se muestra la Figura A44 con la curva completa que relaciona el calor intercambiado, referido a la temperatura de salida de la corriente fría para que esté expresado en términos fácilmente reconocibles, y la longitud del intercambiador necesaria:



*Figura A44: Relación entre el tamaño del IC y el calor transferido para conducciones de 2" y 1"*

En la anterior Figura A44 se observa una región irregular entre 380 y 460 °C aproximadamente. Esta región se debe a las limitaciones de las ecuaciones utilizadas, no son ecuaciones específicas para

fluidos supercríticos, por lo que es de esperar que en ciertas regiones, no sean tan precisas como en otras. Sin embargo, el fluido frío abandonará el intercambiador a una temperatura mayor de 460 °C con total seguridad, ya que si el reactor cuenta con 400 metros de longitud, no tiene sentido imponer que el intercambiador tenga un tamaño menor a 10 metros, puesto que el ahorro en espacio es mínimo.

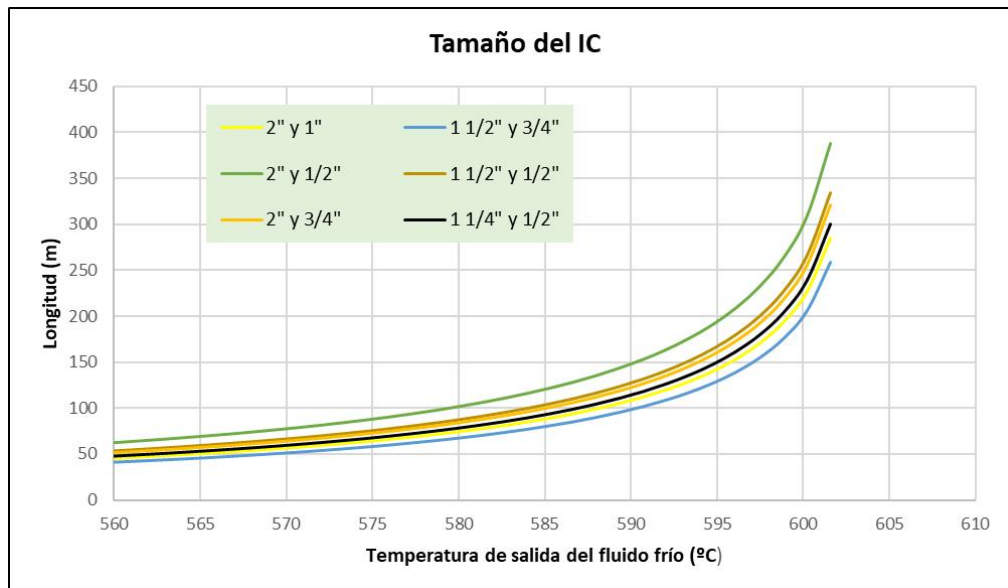
Para seleccionar la longitud hay que estudiar con más detalle la región de la curva con mayor potencial, es decir, una longitud del intercambiador entre 20 y 75 metros. Sin embargo, es necesario estudiar si otras combinaciones en cuanto a diámetros de las conducciones ofrece mejores resultados. Las posibles combinaciones entre diámetros de espesor XXS (hay mucha diferencia entre el espesor 160 y el XXS, por lo que para todos los diámetros se prevé que sea necesario el mayor espesor) se muestran en la siguiente Tabla A35, siendo los cuadros verdes las combinaciones posibles:

*Tabla A35: Posibles combinaciones entre conducciones exterior e interior*

Interior Exterior	1" XXS $d_e = 33,4 \text{ mm}$	3/4" XXS $d_e = 26,7 \text{ mm}$	1/2" XXS $d_e = 21,3 \text{ mm}$
2" XXS $D_0 = 38,18 \text{ mm}$	$d_i = 15,22 \text{ mm}$ $D_H = 4,78 \text{ mm}$	$d_i = 11,06 \text{ mm}$ $D_H = 11,48 \text{ mm}$	$d_i = 6,36 \text{ mm}$ $D_H = 16,88 \text{ mm}$
1 1/2" XXS $D_0 = 27,98 \text{ mm}$	$d_e > D_0$	$d_i = 11,06 \text{ mm}$ $D_H = 1,28 \text{ mm}$	$d_i = 6,36 \text{ mm}$ $D_H = 6,68 \text{ mm}$
1 1/4" XXS $D_0 = 22,8 \text{ mm}$	$d_e > D_0$	$d_e > D_0$	$d_i = 6,36 \text{ mm}$ $D_H = 1,5 \text{ mm}$

Los cuadros en rojo en la anterior Tabla A35 hacen referencia que el diámetro externo del tubo interior es mayor que el diámetro interno del tubo exterior, por lo que el intercambiador no podría montarse.

A continuación, se muestra mediante la Figura A45 una comparación de la longitud del IC necesaria para las distintas combinaciones presentadas en la anterior Tabla A35:



*Figura A45: Comparativa entre el tamaño del IC para las posibles combinaciones de diámetro entre las conducciones*

En la anterior Figura A45 se observa que las distintas curvas están bastante cerca unas de otras y que la combinación que permite una menor longitud del intercambiador de calor es un tubo externo de 1 1/2" XXS junto con uno interno de 3/4" XXS. La segunda mejor opción, es decir, la primera que se estudió y con la que se ejemplificó el cálculo, cuenta tubos de mayor diámetro. Este detalle significa que la curva azul es aún mejor en comparación con esta segunda opción, ya que tendría, en principio, un menor coste al ser menos material y, además, necesitaría una menor cantidad de aislante.

Una vez elegida la combinación de diámetros que ofrece mejores resultados, se debe comprobar que el tubo interior sea capaz de soportar una presión externa de 25 MPa, puesto que, en diversas situaciones como puede ser el propio inicio de la operación, se encontrará con esta presión por su cara externa y la ambiental por la interna.

Es necesario verificar que no exista pandeo alguno de la tubería bajo presión externa según las reglas de diseño de presión externa definidas en el Código ASME BPV, Sección VIII, División 1 (2010) [27]. A partir de dicha norma se calculará la presión externa que es capaz de soportar una tubería con las dimensiones estudiadas y, en caso de que no sea capaz de soportar 28,125 MPa (un 12,5% más que la presión de operación), sería necesario utilizar un espesor superior. Evidentemente, en el caso de que esto sea necesario, habría que seleccionar un diámetro menor, ya que no se comercializan tubos de Inconel 625 de 3/4" con un espesor mayor y mandarlos a hacer a medida aumentaría mucho el coste de los mismos.

En el Código ASME BPV (2010) se presentan dos ecuaciones diferentes para el cálculo de la máxima presión externa soportable, según sea el cociente entre el diámetro exterior y el espesor de la tubería mayor o menor que 10. En el caso en cuestión:

$$\frac{d_e}{t_m} = \frac{26,7}{7,82} = 3,41$$

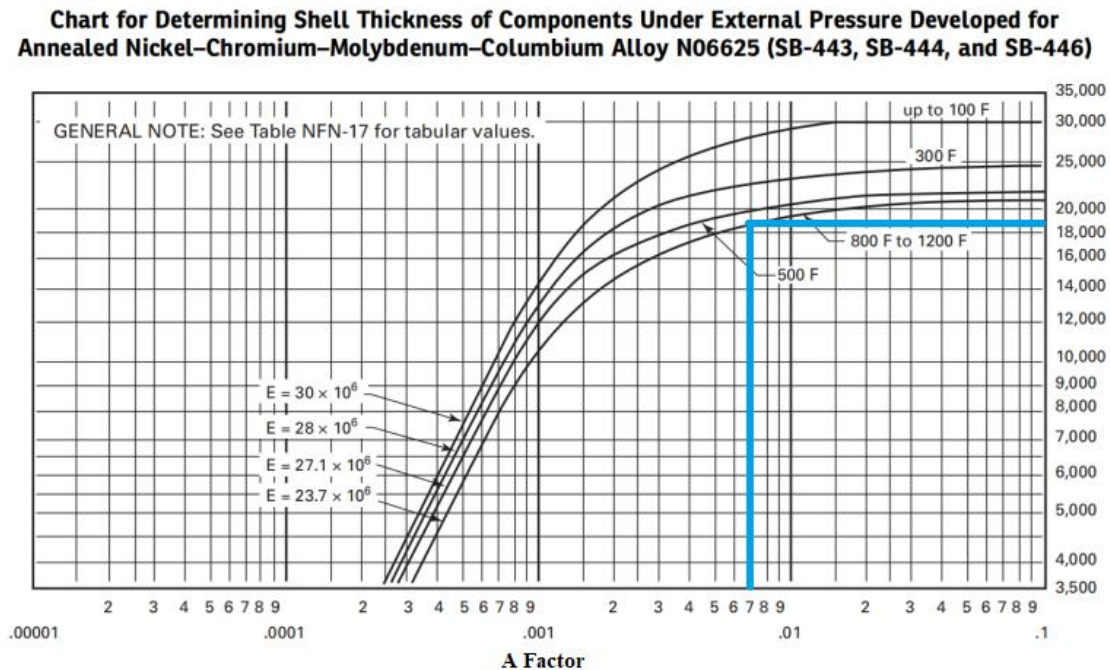
Para tuberías con valores de este cociente menores que 10, el cálculo de la presión externa máxima admisible se obtiene por medio de la siguiente expresión (ecuación 32):

$$P_a = \frac{B \cdot t_m}{r_e} \tag{32}$$

Siendo “B” un factor determinado a partir de la gráfica correspondiente al Inconel 625 presente en la subparte 3 de la Sección II del código ASME BPV (2019). Sin embargo, para obtener el valor de B, debe calcularse primeramente A, factor que se obtendrá de la siguiente expresión:

$$A = \frac{0,0125}{r_e/t_m} = \frac{0,0125}{0,0134/0,00747} = 0,007$$

A continuación, se muestra la Figura A46 perteneciente a la Sección II del código mencionado, a partir de la cual se obtiene el valor del factor B, teniendo en cuenta que la operación ocurrirá a una temperatura máxima de 630 °C, la cual equivale a 1166 °F:

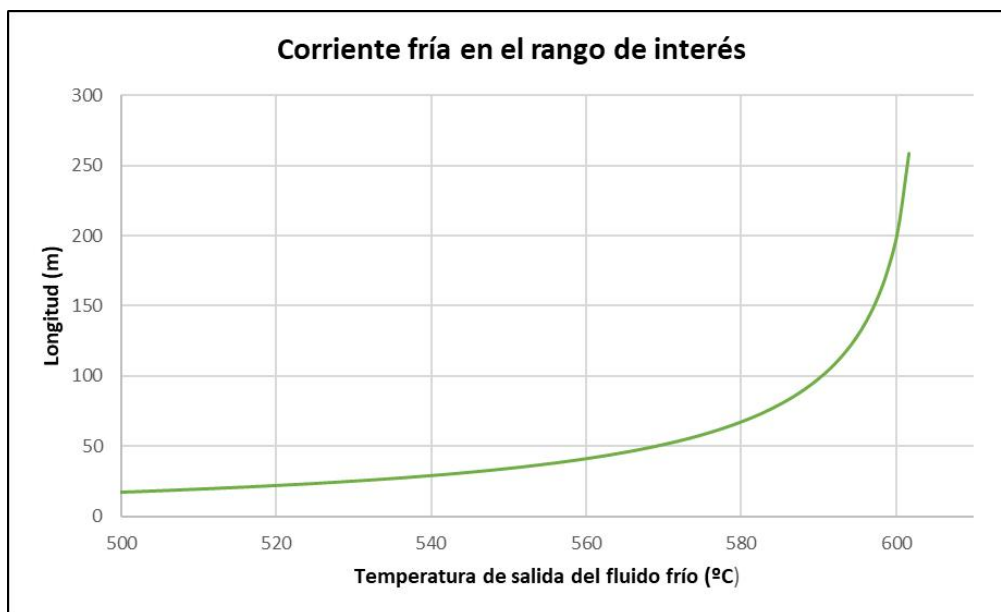


*Figura A46: Relación entre los factores A y B en función de la temperatura, Sección II, Código ASME 2019 [28]*

Como se observa en la anterior Figura A46, el factor B cuenta con un valor algo superior a 18000 psi o, lo que es lo mismo, 124 MPa. Una vez conocido este factor ya es posible calcular la presión externa admisible por medio de la ecuación 32:

$$P_a = \frac{B \cdot t_m}{r_e} = \frac{124 \cdot 0,00747}{0,0134} = 69,13 \text{ MPa}$$

El espesor de la tubería interna es suficiente para que la misma soporte sin problemas la presión de diseño, por lo que el siguiente paso es establecer el tamaño del intercambiador de calor con el objetivo de maximizar el calor intercambiado, es decir, la temperatura de salida de las corrientes caliente y fría, pero manteniendo una longitud viable. Anteriormente, se acotó el tamaño del intercambiador entre 20 y 75 metros, por lo que debe estudiarse la influencia del tamaño en este rango sobre las corrientes de salida. Para ello, se hará uso de la siguiente Figura A47 en la que se muestra la influencia del tamaño en la temperatura de salida de la corriente fría para el posible rango de operación:



*Figura A47: Tamaño del IC en función de la temperatura de salida de la corriente fría en el rango de interés*

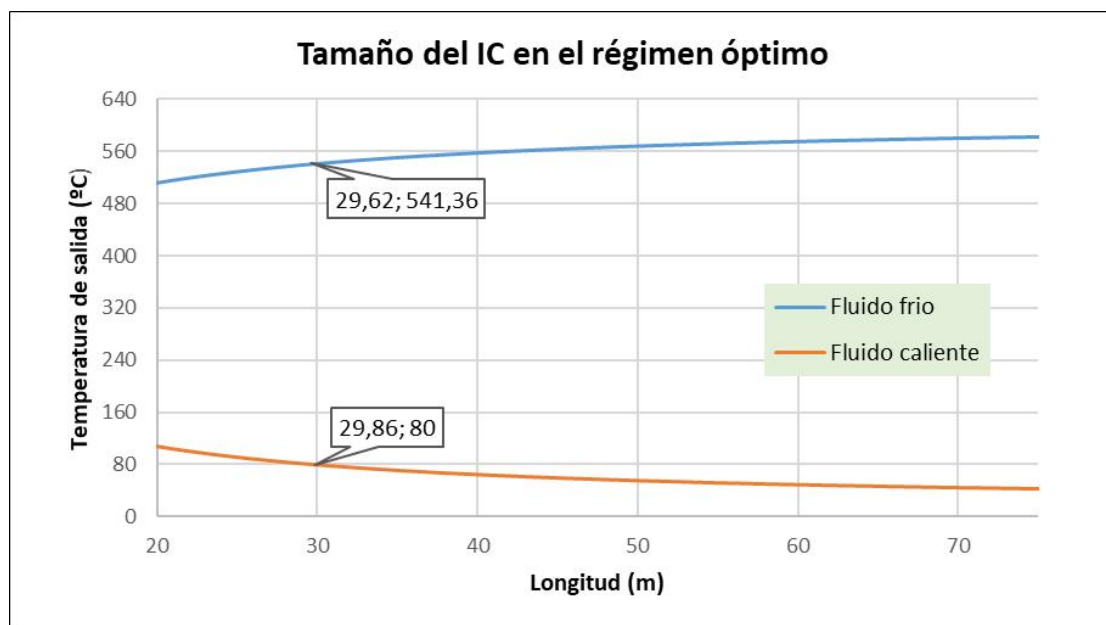
En la anterior Figura A47 se observa que el perfil toma una curva bastante ascendente una vez superados los 50 metros longitud, por lo que el intercambiador de calor del presente proyecto tendrá un menor tamaño. Además, la corriente fría no es la única de interés operacional, ya que en función de la temperatura a la que la corriente caliente abandone el equipo, podría tener algún uso en la propia planta como la posibilidad de generación de vapor de baja presión. En el caso en estudio esto no es posible porque para un IC de 20 metros la corriente caliente saldría del mismo a 100 °C y anteriormente se ha acotado la longitud del equipo entre 20 y 50 metros, por lo que no se alcanzaría la temperatura necesaria para la generación de vapor. Sin embargo, sí que podría ser posible utilizar la corriente de salida para calentar agua para uso sanitario.

Puede generarse agua caliente de uso sanitario mediante instalaciones sencillas o instalaciones con acumulador y circuito de retorno, más eficientes pero clasificadas como “instalaciones con mayor probabilidad de proliferación y dispersión de Legionella”.

Las instalaciones con acumulador presentan ventajas como permitir mantener la temperatura del agua circulante más caliente al volver al depósito en cada ciclo, mejorar el confort de los usuarios porque disponen más rápidamente del agua y suponer un ahorro energético y de consumo de agua importante, ya que evita desechar el agua que había sido previamente calentada.

En el Real Decreto 865/2003, del 4 de julio, por el que se establecen los criterios higiénico-sanitarios para la prevención y control de la legionelosis, incluye a las instalaciones de Agua Caliente Sanitaria (ACS) en su ámbito de aplicación [29]. Debido a que las instalaciones de ACS con acumulador deben mantener cierto volumen de agua en un tanque y que esta, en función de la temperatura de almacenamiento, podría convertirse en un entorno adecuado para el desarrollo de Legionella, el Real Decreto 865/2003 del 4 de julio obliga a garantizar que la temperatura del agua en los acumuladores no descienda de 60 °C.

Con todo esto, la temperatura de salida de la corriente caliente del IC debe ser superior a 60 °C, siendo un margen lógico unos 20 °C más, es decir, para que a partir de dicha corriente sea posible calentar agua para uso sanitario, la misma debe encontrarse a unos 80 °C. A continuación, se muestra la Figura A48 en la que se representa conjuntamente la temperatura de salida del fluido frío y la del caliente en función del tamaño del IC en el régimen óptimo del mismo:



*Figura A48: Comparativa entre la temperatura de salida de ambas corrientes del IC en función del tamaño del mismo en el rango óptimo*

*Diseño de un reactor para la gasificación en agua supercrítica de subproductos del reciclado de fibras de carbono de la industria aeronáutica*

Atendiendo a la anterior Figura A48 y el objetivo marcado de que la corriente caliente abandone el intercambiador a unos 80 °C, el tamaño de dicho intercambiador será de 30 m. A continuación, se interpolarán la temperatura de salida de ambos fluidos a partir de los puntos de la curva anterior y posterior a dicha longitud.

Fluido frío:

$$\frac{541,36 - 542,6}{29,62 - 30,2} = \frac{541,34 - T_{frío}}{29,62 - 30}$$

$$T_{frío} = 542,17 \text{ °C}$$

Fluido caliente:

$$\frac{80 - 79}{29,86 - 30,375} = \frac{80 - T_{caliente}}{29,86 - 30}$$

$$T_{caliente} = 79,73 \text{ °C}$$

A continuación, se muestra una captura de pantalla de la hoja de cálculo de Excel en la que se ha desarrollado el cálculo de la temperatura de salida de la corriente fría en función de la temperatura de la caliente, así como el tamaño que debe tener el intercambiador de calor para que se obtengan dichas corrientes de salida:

	Alimentación	Productos		Ø externo	Ø interno	D <sub>H</sub>	Longitud de entrada térmica
Caudal másico (g/s)	43,296	43,26	Conducción exterior	0,0483	0,02798	0,00128	0,0128
Caudal molar (mol/s)	2,369	2,386	Conducción interior	0,0267	0,01106	-	0,1106

Tª salida hot (°C)	Q cedido (kW)	Tª sal frío aprox (°C)	Q ganado aprox (kW)	Tª sal frío real (°C)	ΔTml (°C)	hi (W/m²·K)	k (W/m·K)	he (W/m²·K)	R total (m·K/W)	Ui (W/m²·K)	Área (m²)	Longitud (m)
25	146,035	603	146,039	602,97	-	7257,9	14,30	338426	0,0145	1983,6	-	-
26	145,860	601	145,783	601,59	8,189	7263,7	14,31	337538	0,0145	1984,5	8,98	258,31
27	145,684	600	145,655	600,22	10,285	7269,6	14,32	337409	0,0145	1985,6	7,13	205,31
28	145,509	599	145,527	598,86	12,027	7275,4	14,32	337291	0,0145	1986,7	6,09	175,27
29	145,333	598	145,398	597,49	13,606	7281,5	14,33	336405	0,0145	1987,6	5,37	154,67
30	145,157	596	145,141	596,13	15,091	7287,4	14,34	336295	0,0145	1988,7	4,84	139,21
31	144,982	594	144,882	594,77	16,513	7293,6	14,34	336198	0,0145	1989,8	4,41	126,99
32	144,806	594	144,882	593,41	17,891	7299,7	14,35	335315	0,0145	1990,6	4,07	117,02
33	144,631	592	144,623	592,06	19,236	7306,0	14,36	335230	0,0144	1991,8	3,77	108,64
34	144,455	591	144,493	590,70	20,555	7312,3	14,37	335152	0,0144	1992,9	3,53	101,49
35	144,279	589	144,233	589,35	21,854	7318,8	14,37	334270	0,0144	1993,8	3,31	95,30
36	144,103	588	144,103	588,00	23,137	7325,2	14,38	334202	0,0144	1995,0	3,12	89,85
37	143,928	587	143,972	586,66	24,405	7331,8	14,39	334145	0,0144	1996,1	2,95	85,03
38	143,752	585	143,711	585,32	25,662	7338,5	14,40	333264	0,0144	1997,0	2,81	80,73
39	143,576	584	143,579	583,98	26,909	7345,3	14,40	333216	0,0144	1998,2	2,67	76,85
40	143,400	583	143,448	582,64	28,146	7352,0	14,41	333176	0,0144	1999,4	2,55	73,34
41	143,225	581	143,185	581,30	29,377	7358,3	14,42	332297	0,0144	2000,3	2,44	70,15
42	143,049	580	143,053	579,97	30,600	7364,6	14,43	332266	0,0144	2001,4	2,34	67,22
43	142,873	578	142,788	578,64	31,817	7371,8	14,43	332242	0,0144	2002,6	2,24	64,53
44	142,697	577	142,655	577,31	33,029	7379,0	14,44	331366	0,0144	2003,6	2,16	62,06
45	142,521	576	142,523	575,99	34,235	7386,4	14,45	331351	0,0144	2004,8	2,08	59,76
46	142,345	575	142,389	574,67	35,437	7393,7	14,45	331347	0,0143	2006,0	2,00	57,63
47	142,169	573	142,123	573,35	36,635	7401,4	14,46	330472	0,0143	2007,0	1,93	55,65
48	141,993	572	141,989	572,03	37,828	7409,0	14,47	330476	0,0143	2008,2	1,87	53,79
49	141,817	571	141,855	570,72	39,018	7416,9	14,48	330486	0,0143	2009,5	1,81	52,06
50	141,641	569	141,586	569,41	40,204	7424,6	14,48	329613	0,0143	2010,5	1,75	50,43
51	141,465	568	141,451	568,10	41,387	7432,8	14,49	329631	0,0143	2011,8	1,70	48,90
52	141,289	566	141,181	566,79	42,567	7440,9	14,50	329656	0,0143	2013,1	1,65	47,45
53	141,113	566	141,181	565,49	43,743	7449,4	14,51	328787	0,0143	2014,1	1,60	46,10
54	140,936	564	140,910	564,20	44,917	7457,7	14,51	328819	0,0143	2015,4	1,56	44,81
55	140,760	563	140,774	562,90	46,088	7466,5	14,52	328859	0,0143	2016,8	1,51	43,58
56	140,584	561	140,501	561,61	47,256	7475,1	14,53	327991	0,0143	2017,8	1,47	42,43
57	140,408	560	140,364	560,32	48,422	7484,2	14,54	328040	0,0143	2019,2	1,44	41,33
58	140,232	559	140,227	559,03	49,585	7493,1	14,54	327175	0,0142	2020,2	1,40	40,29
59	140,055	558	140,090	557,75	50,745	7502,6	14,55	327230	0,0142	2021,6	1,37	39,29
60	139,879	556	139,814	556,47	51,904	7511,9	14,56	327291	0,0142	2023,0	1,33	38,34
61	139,703	555	139,676	555,19	53,060	7521,6	14,57	326429	0,0142	2024,1	1,30	37,44
62	139,526	554	139,538	553,92	54,213	7531,3	14,57	326498	0,0142	2025,5	1,27	36,57
63	139,350	553	139,399	552,65	55,365	7541,5	14,58	326575	0,0142	2027,0	1,24	35,74
64	139,173	551	139,120	551,38	56,514	7551,5	14,59	325715	0,0142	2028,1	1,21	34,95
65	138,997	550	138,981	550,12	57,661	7562,1	14,59	325797	0,0142	2029,6	1,19	34,18



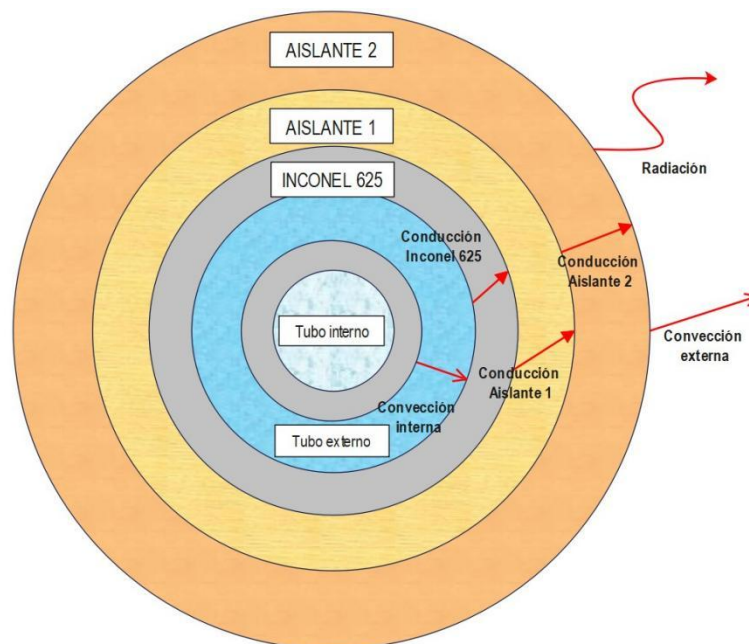
## 5.2 CÁLCULO DEL AISLANTE

El presente anexo tiene como objetivo desarrollar el cálculo para el espesor del aislante requerido para que el intercambiador de calor cumpla con la normativa vigente y las limitaciones energéticas impuestas en el presente proyecto.

En cuanto a normativa, debe atenderse, al igual que para el cálculo del aislante del reactor, a la norma UNE-EN ISO 12241:2010 “Aislamiento térmico para equipos de edificación e instalaciones industriales”, la cual dicta que la temperatura máxima para equipos industriales que estén expuestos al posible contacto es de 60 °C. Sin embargo, se buscará alcanzar una temperatura superficial de 40 °C para minimizar las pérdidas energéticas, siendo 50 °C la máxima temperatura superficial admisible. Además, según el Real Decreto 178/2021, las temperaturas operativas de equipos de refrigeración y calefacción deben estar entre 21 y 25 °C, por lo que se realizará el cálculo del aislante necesario para una temperatura ambiente de 21 °C.

En cuanto al material, se utilizarán los mismos que para el reactor, es decir, una coquilla de lana mineral con un diámetro interno nominal de 1 1/2” que se ajuste a la perfección al exterior del intercambiador de calor para evitar la formación de puentes térmicos y el aislamiento sea mucho más eficiente. Posteriormente, en el caso de ser necesario, se colocará una manta de lana mineral del espesor requerido para cumplir con la temperatura superficial de diseño. Por último, se colocará una fina lámina de aluminio brillante para compactar el aislante y evitar el deterioro del mismo.

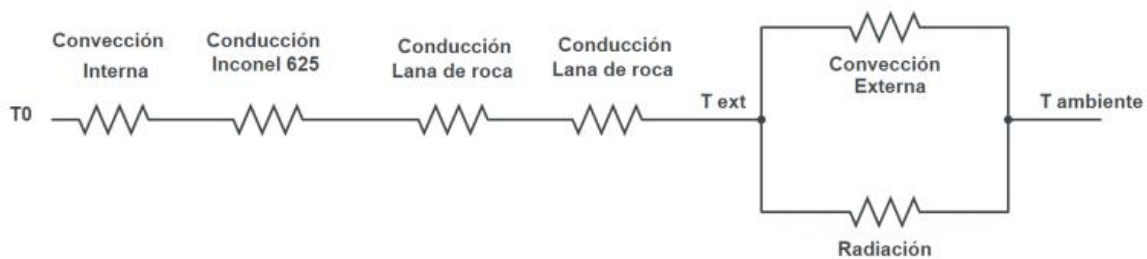
A continuación, se muestra en la Figura A49 una representación de la transmisión de calor de forma radial en el sistema compuesto por el intercambiador de calor y los dos aislantes:



*Figura A49: Representación de la transferencia de calor en el IC*

Se calculará el espesor de aislante necesario para que la temperatura superficial del mismo sea de 40 °C tomando la mayor temperatura del fluido del tubo externo, es decir, 542,2 °C.

El esquema eléctrico equivalente es idéntico al presentado para el reactor en el Anexo 4. Se trata de una resistencia a la convección interna (en el tubo externo), de la cual ya se determinó el coeficiente de convección, seguida de una resistencia a la conducción a través del espesor del tubo exterior del IC, la sección de lana de roca y la manta del mismo material. Por último, encontramos dos mecanismos en paralelo de transmisión de calor, convección externa y radiación. En la siguiente Figura A50 se presenta dicho circuito equivalente:



*Figura A50: Esquema del circuito eléctrico equivalente*

El cálculo a realizar es idéntico al desarrollado en el Anexo 4.4, por lo que en el presente anexo solo se atenderá a los resultados y conceptos de mayor importancia.

El siguiente paso no es otro que calcular la resistencia total siguiendo las reglas de los circuitos eléctricos:

Si las resistencias se encuentran en serie:

$$R_{Total} = R_1 + R_2 + R_3 \dots$$

Si las resistencias se encuentran en paralelo:

$$\frac{1}{R_{Total}} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} + \frac{1}{R_3} \dots$$

A continuación, se mostrará individualmente el cálculo correspondiente a cada resistencia térmica:

$$R_{conducción} = \ln(r_{ext}/r_{int})/2\pi k$$

$$R_{convección} = \frac{1}{2 \pi r h_{conv}}$$

$$R_{radiación} = \frac{1}{2 \pi r h_{radiación}}$$

Debe calcularse, y reducirse, el flujo de calor entre el interior de la tubería y el ambiente externo de la misma. Para ello, se atenderá a la ecuación general de transferencia de calor, ya mostrada anteriormente en el Anexo 4.2 (ec. 16):

$$Q = \frac{\text{Fuerza impulsora}}{\text{Resistencia total}} = \frac{\Delta T}{R_{\text{total}}}$$

A continuación, se hará un breve repaso de lo que se conoce de cada resistencia térmica:

- Coeficiente de convección interno

El coeficiente de convección interno del tubo externo se calculó anteriormente durante el dimensionamiento del presente intercambiador de calor, aunque el caso que se ejemplificó era a otra temperatura. Se mostrarán, a continuación, los aspectos más importantes del cálculo para una temperatura de 542 °C, como son los valores de los números adimensionales Re, Pr, Nu y valor de  $h_c$ :

$$D_H = D_i - d_e = 0,02798 - 0,0267 = 0,00128 \text{ m}$$

$$\text{Re} = \frac{4 \cdot Q \cdot \rho}{\pi \cdot D_H \cdot \mu} = \frac{4 \cdot \frac{2,231 \text{ mol/s}}{1000 \cdot 4,442 \text{ mol/L}} \cdot 19,41 \text{ g/mol} \cdot 4,442 \text{ mol/L}}{\pi \cdot 0,00128 \text{ m} \cdot 3,236 \cdot 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s}} = 1,331 \cdot 10^6$$

$$\text{Pr} = \frac{\mu \cdot C_p}{k} = \frac{3,236 \cdot 10^{-5} \text{ Pa}\cdot\text{s} \cdot 3295 \text{ J/kg}\cdot\text{K}}{0,100 \text{ W/m}\cdot\text{K}} = 1,065$$

Una vez conocidos estos valores se calcula el Nu de la misma forma que en los casos anteriores:

$$\text{Nu} = 0,023 \cdot 1331077^{0,8} \cdot 1,065^{0,3} = 1859$$

A continuación, a partir de la definición del Nusselt se calcula el valor del coeficiente de convección:

$$h_{cv\_int} = \frac{\text{Nu} \cdot k}{D_H} = \frac{1859 \cdot 0,100}{0,00128} = 145234 \text{ W/m}^2\cdot\text{K}$$

- Conductividad térmica del Inconel 625

Para el cálculo de la transferencia de calor por conducción se debe utilizar el valor de la conductividad térmica a la temperatura media del material. Debido a los elevados valores de conductividad térmica del Inconel 625, no se espera una disminución de más de un par de grados a lo largo del mismo. Sin embargo, no se conoce la temperatura de la pared interna del tubo exterior del IC, la cual está en contacto con el fluido a 542 °C (en la zona de mayor temperatura) pero eso no implica que la pared del IC se encuentre a esa temperatura. Por tanto, se empleará la ecuación resultante de la regresión lineal realizada en el Anexo 4, la cual permite conocer la conductividad térmica del Inconel 625 en función de la temperatura.

A continuación, se muestra la expresión obtenida a partir de los datos ofrecidos por la empresa “Special Metals”:

$$k = 0,0147 \cdot T + 9,4862$$

De la ecuación de transferencia de calor mediante conducción para la pared del intercambiador no se conoce el flujo de calor transmitido ni la temperatura de las caras externa e interna de la pared del equipo, por lo que aún no puede aplicarse la misma.

- Conductividad térmica de la primera capa de lana mineral

Como es la primera capa es de vital importancia que esta se amolde a la perfección a la tubería, por lo que se usarán coquillas de lana mineral, reduciendo así la posibilidad de que se produzcan puentes térmicos. Al igual que para el aislante del reactor, se ha seleccionado el aislamiento industrial para tuberías U TECH Pipe Section MT 4.0, ofertado por la empresa “ISOVER” y conformado por lana mineral ULTIMATE con forma cilíndrica y estructura concéntrica, que además, llevan practicada una abertura en su generatriz para permitir su colocación sobre la tubería. Cuenta con un espesor de 60 mm.

A continuación, se muestra la expresión para el cálculo de la conductividad térmica del material en función de la temperatura de operación, obtenida a partir de los datos de conductividad ofrecidos por la empresa:

$$k = 2,3038 \cdot 10^{-7} \cdot T^2 + 6,1074 \cdot 10^{-5} \cdot T + 0,03656$$

Al igual que ocurre para la pared del IC, no se conoce el flujo de calor a través de la capa del primer aislante ni la temperatura de las caras externa e interna del mismo.

- Conductividad térmica de la segunda capa de lana mineral

De la misma forma que para el primer aislante, se han estudiado aquellos materiales que presentaban una menor conductividad térmica. Esta segunda capa estará conformada por el aislante TECH Wired Mat MT 4.2 que presenta una temperatura máxima de exposición de 600 °C, quizás se podría haber usado un material con unas propiedades algo más pobres, pero sería muy práctico utilizar el mismo aislante que para el reactor tanto para el pedido inicial como para los posibles cambios por deterioro con el uso.

A continuación, se presenta la expresión que relaciona la conductividad térmica del aislante con la temperatura del mismo:

$$k = 4,1402 \cdot 10^{-7} \cdot T^2 + 5,1201 \cdot 10^{-5} \cdot T + 0,037649$$

Para el caso del segundo aislante no se conoce el espesor del mismo, aunque lo ideal sería poder trabajar con mantas de un espesor de 70 mm al igual que para el reactor. Sin embargo, sí se conoce la temperatura de su cara externa, puesto que esta es la temperatura de diseño, la cual será, en un principio, 40 °C.

- Coeficiente de convección externo

Para el cálculo del coeficiente de convección externo se procederá de la misma manera que en el Anexo 4.4, se trata de convección natural y el fluido es aire a presión atmosférica y 21 °C. La ecuación para el cálculo del Nusselt para convección natural para una geometría cilíndrica es la siguiente (ecuación 22):

$$\text{Nu} = \left\{ 0,6 + \frac{0,387\text{Ra}^{1/6}}{[1 + (0,599/\text{Pr})^{9/16}]^{8/27}} \right\}^2 \quad (22)$$

Como se puede ver, la expresión del Nusselt depende de dos números adimensionales, el Rayleigh (Ra) y el Prandtl (Pr), los cuales hay que determinar para poder resolver la ecuación anterior. Estos números adimensionales se calculan exactamente igual que para el caso del reactor, es decir, con las propiedades del fluido (aire) a la temperatura de película:

$$T_f = \frac{1}{2}(T_s + T_\infty) = \frac{1}{2}(40 + 21) = 30,5 \text{ }^\circ\text{C}$$

A continuación, se muestra la expresión de cálculo del Rayleigh:

$$\text{Ra} = \frac{\text{g} \cdot \beta \cdot (T_s - T_\infty) \cdot \text{LC}^3}{\alpha \cdot \nu}$$

Se pueden determinar todos los parámetros necesarios menos el diámetro externo del sistema, el cual depende del espesor de aislante seleccionado. Sin embargo, no se conoce el espesor del segundo aislante, por lo que se procederá suponiendo un valor para el radio final con el aislante y calculando el calor cedido al entorno mediante radiación y convección. A partir del valor del flujo de calor en el sistema se podrán calcular las temperaturas de las distintas capas y el espesor de los aislantes para esa transferencia de calor. La solución será correcta cuando el radio de aislante calculado y el supuesto coincidan. Esta metodología de cálculo se implementará en una hoja de cálculo de Excel, idéntica a la utilizada en el Anexo 4.4 para el caso del reactor, con el objetivo de poder variar la temperatura en la superficie o el radio supuesto y que se recalculen todo de forma casi inmediata. La única diferencia es que utilizar como aislante exterior la misma manta de lana mineral que para el reactor (manta de 70 mm) tiene cierto valor añadido, ya que simplifica el pedido a realizar, el almacenamiento del mismo y no sería necesario contar con distintos aislantes de recambio por si se deteriora alguna sección. Por tanto, el primer radio supuesto será:

$$r_{ext} = \frac{0,0483}{2} + 0,06 + 2 \cdot 0,07 = 0,224 \text{ m}$$

A continuación, se mostrarán los resultados más importantes del cálculo para este primer radio supuesto:

El cálculo del Rayleigh (Ra) es el siguiente:

$$\text{Ra} = \frac{9,81 \cdot \frac{1}{303,5} \cdot (40 - 21) \cdot (0,224 \cdot 2)^3}{2,208 \cdot 10^{-5} \cdot 1,608 \cdot 10^{-5}} = 1,555 \cdot 10^8$$

A continuación, se muestra el cálculo del Nusselt (ecuación 22):

$$Nu = \left\{ 0,6 + \frac{0,387 \cdot (1,555 \cdot 10^8)^{1/6}}{[1 + (0,599/1,065)^{9/16}]^{8/27}} \right\}^2 = 64,40$$

Siguiendo la definición del Nusselt se calcula el coeficiente de convección externo:

$$Nu = \frac{h \cdot L}{k}; h_{cv\_ext} = \frac{Nu \cdot k}{D_{ext}} = \frac{64,40 \cdot 0,02588}{0,224 \cdot 2} = 3,720 \text{ W/m}^2\text{K}$$

Se continúa con el cálculo de la resistencia a la convección externa:

$$R_{cv\_ext} = \frac{1}{2 \cdot \pi \cdot r_{ext} \cdot h_{cv\_ext}} = \frac{1}{2 \cdot \pi \cdot 0,224 \cdot 3,720} = 0,191 \text{ m}\cdot\text{K/W}$$

Y, por último, el flujo de calor por unidad de longitud a partir de la ecuación de transferencia de calor por convección:

$$Q/L_{cv\_ext} = \frac{\Delta T}{R_{cv\_ext}} = \frac{T_s - T_\infty}{R_{cv\_ext}} = \frac{40 - 21}{0,191} = 99,484 \text{ W/m}$$

#### ● Radiación

Tras la capa de aislante de lana mineral se colocará una chapa de aluminio de poco espesor para proteger al aislante del contacto y la humedad, por lo que para el cálculo del calor cedido por radiación debe atenderse a la emisividad del aluminio que para el caso de aluminio brillante es de 0,05.

El cálculo del calor cedido por radiación es el siguiente:

$$Q/L_{radiación} = \sigma \cdot \varepsilon \cdot 2 \cdot \pi \cdot r \cdot (T_s^4 - T_\infty^4) = 5,67 \cdot 10^{-8} \cdot 0,05 \cdot \pi \cdot 0,224 \cdot (313^4 - 294^4) = 8,486 \text{ W/m}$$

El flujo de calor total por metro del reactor es la suma del cedido por radiación y el de convección:

$$Q/L = Q/L_{conv\_ext} + Q/L_{radiación} = 99,484 + 8,486 = 107,970 \text{ W/m}$$

Una vez calculado el flujo de calor ya es posible determinar el resto de temperaturas. Para obtener la temperatura de la pared interna del reactor, solo debe despejarse esta variable de la ecuación de convección.

A continuación, se calculará la resistencia a la convección interna:

$$R_{cv\_int} = \frac{1}{2 \cdot \pi \cdot r_{int} \cdot h_{cv\_int}} = \frac{1}{\pi \cdot 0,02798 \cdot 145239} = 0,0001 \text{ m}\cdot\text{K/W}$$

Por tanto:

$$T_{IC\ int} = T_0 - \frac{Q}{L} \cdot R_{cv\_int} = 542,2 - 107,970 \cdot 0,0001 = 542,19 \text{ }^\circ\text{C}$$

Ahora que se conoce la temperatura de la cara interna del reactor, puede estimarse la conductividad térmica del material del mismo, la cual se calculará en una primera instancia a 542 °C, y, en consecuencia, será posible calcular la resistencia térmica de la conducción:

$$R_{\text{cond\_Inconel}} = \frac{\ln(r_{r \text{ ext}}/r_{r \text{ int}})}{2 \pi k_{\text{Inconel}}} = \frac{\ln(0,02415/0,01399)}{2 \cdot \pi \cdot 17,44} = 0,00498 \text{ m}\cdot\text{K}/\text{W}$$

Para calcular la temperatura en la cara externa de la pared del reactor se realiza lo mismo que para la cara interna, pero incluyendo la conducción a través del Inconel 625:

$$Q = \frac{T_0 - T_{\text{IC ext}}}{R_{\text{cv\_int}} + R_{\text{cd\_Inconel}}}; T_{\text{IC ext}} = T_0 - Q \cdot (R_{\text{cv\_int}} + R_{\text{cd\_Inconel}})$$

Sustituyendo los valores conocidos:

$$T_{r \text{ ext}} = 542,2 - 107,970 \cdot (0,0001 + 0,00498) = 541,65 \text{ }^\circ\text{C}$$

El incremento de temperatura es muy pequeño, por lo que no tiene sentido volver a realizar el cálculo reajustando la conductividad térmica del material.

A continuación, se muestra el cálculo de la resistencia a la conducción a través del primer aislante, cuyo espesor es de 60 mm, utilizando la conductividad de la lana mineral a 400 °C:

$$R_{\text{cond\_LR}} = \frac{\ln(r_{\text{LR}}/r_{r \text{ ext}})}{2 \pi k_{\text{LR}}} = \frac{\ln(0,08415/0,02415)}{2 \cdot \pi \cdot 0,100} = 1,987 \text{ m}\cdot\text{K}/\text{W}$$

El cálculo para la temperatura al final del aislante es el siguiente:

$$Q = \frac{T_0 - T_{\text{LR}}}{R_{\text{cv\_int}} + R_{\text{cd\_Inconel}} + R_{\text{cd\_LR}}} \tag{23}$$

Despejando y calculando la temperatura en este punto:

$$T_{\text{LR}} = T_0 - Q \cdot [R_{\text{conv\_int}} + R_{\text{cond\_Inconel}} + R_{\text{cond\_LR}}]$$

$$T_{\text{LR}} = 542,2 - 107,970 \cdot (0,0001 + 0,00498 + 1,987) = 327,14 \text{ }^\circ\text{C}$$

La temperatura media de operación del aislante es la siguiente:

$$T_m = \frac{541,65 + 327,14}{2} = 439,40 \text{ }^\circ\text{C}$$

Es una diferencia notable respecto al primer resultado, por lo que debe repetirse el cálculo varias veces hasta obtener una mínima variación de la temperatura final. A continuación, se muestra la Tabla A36 con la estructura del cálculo para la última iteración del caso en cuestión:

*Tabla A36: Cálculo de la temperatura externa del primer aislante*

Conducción Lana de Roca Section Pipe		
Conductividad	0,1089	W/m·K
Radio int	0,02415	m
Espesor	0,06	m
Radio ext	0,08415	m
Tª Reactor ext	541,65	°C
R cond LM (SP)	1,824	m·K/W
Tª Aislante 1	344,68	°C
Nueva conductividad	0,10888	W/m·K

A continuación, se muestra la ecuación correspondiente a la transferencia de calor a través del segundo aislante:

$$Q = \frac{T_{LR} - T_{ext}}{R_{cd\_MLR}}$$

A partir de la ecuación anterior y de la suposición de la temperatura de la cara externa del aislante se obtiene el valor de la resistencia a la conducción en dicha capa:

$$R_{cd\_MLR} = \frac{T_{LR} - T_{ext}}{Q} = \frac{344,68 - 40}{107,970} = 2,822 \text{ m·K/W}$$

Y a partir del concepto de resistencia térmica a la conducción, se despeja el radio externo:

$$R_{cd\_MLR} = \frac{\ln(r^{ext}/r_{LR})}{2 \pi k_{MLR}} ;$$

$$r_{LV} = r_{LR} \cdot e^{R_{cond\_LV} 2 \pi k_{LV}} \tag{25}$$

Para el segundo aislante sí puede calcularse la temperatura de servicio media, puesto que la Ts se fijó en 40 °C:

$$T_m = \frac{344,68 + 40}{2} = 192,34 \text{ °C}$$

Esta será la temperatura a la que se evalúe la conductividad térmica del segundo aislante

A continuación, se muestra el cálculo del radio externo a partir de la ecuación 25:

$$r_{ext} = 0,08415 \cdot e^{2,822 \cdot 2 \cdot \pi \cdot 0,0628} = 0,256 \text{ m}$$

El radio supuesto y el calculado no difieren en gran medida uno del otro, por lo que si se trabaja con el espesor de aislante considerado, la temperatura de la cara externa no será mucho mayor que 40 °C. El cálculo se realizará mediante la función “Buscar objetivo” en Excel, siendo dicho objetivo que el radio del segundo aislante sea igual al radio supuesto (radio del primer aislante más el espesor deseado) siendo la variable a modificar la temperatura superficial. A continuación, se presenta la Tabla A37 con un resumen de los resultados:



*Tabla A37: Resumen de resultados de las temperaturas y espesores de aislante del IC*

Resultados finales		
Tª Fluido	542,2	°C
Tª Pared reactor int	542,19	°C
Tª Pared reactor ext	541,62	°C
Tª Aislante 1	331,94	°C
Tª Aislante 2	40,95	°C
Espesor Aislante 1	0,06	m
Espesor Aislante 2	0,140	m
Radio ext	0,224	m
Flujo de calor	114,933	W/m

La temperatura superficial del segundo aislante en estas condiciones sería de 40,95 °C, por lo que la manta de 70 mm de lana mineral (2 vueltas) es una muy buena solución. Además, está el beneficio añadido de que tanto el reactor como el intercambiador, utilizarán el mismo aislante para la segunda capa.

### **5.3 CALOR A APORTAR POR EL CALENTADOR**

El presente apartado tiene como objetivo calcular el calor que debe aportar el calentador final para que la corriente de alimentación alcance las condiciones de reacción, es decir, 650 °C, ya que abandona el intercambiador de calor a 542,2 °C.

Este cálculo se realizó anteriormente para el diseño del intercambiador de calor, puesto que era necesario conocer el calor que debía ganar la corriente fría para alcanzar cierta temperatura.

Como se indicó en el Anexo 5.1, para calcular el calor que debe ganar la corriente fría se atenderá a la capacidad calorífica de dicha corriente. La corriente de alimentación (corriente caliente) está compuesta por agua y fenol, estando este último en una proporción bastante menor, por lo que pueden aproximarse las propiedades de la corriente a las del agua pura. El cálculo se realizará mediante pequeños incrementos de temperatura o, lo que es lo mismo, integrando la ecuación de la curva del Cp respecto a la temperatura.

Como se mencionó en el anterior anexo, el cálculo se ha realizado en una hoja de Excel, lo que lo hace mucho menos laborioso, se ha calculado el calor que debe ganar la corriente para aumentar en un grado Celsius su temperatura a una temperatura dada (anterior ecuación 30), y se ha hecho el sumatorio para todas las temperaturas desde 542,2 °C a 650 °C.

$$C = C_p \cdot W_m \tag{30}$$

Para el caso de 542 °C, el valor de la capacitancia térmica (a esa temperatura) se multiplicará por 0,8 para corregir el hecho de que ingresa en el calentador a 542,2 °C en vez de 542 °C.

A continuación, se muestran las tablas A38 y A39 con parte de la hoja de cálculo implementada en Excel para determinar el calor que debe aportarse a la corriente de alimentación tras su salida del IC:

*Tabla A38: Cálculo del calor a aportar por el calentador (inicio)*

<b>Calor necesario para que la alimentación alcance la temperatura de reacción</b>				
<b>Temperatura (°C)</b>	<b>C<sub>p</sub> (kJ/g·°C)</b>	<b>Capacitancia (kW/°C)</b>	<b>Incremento de Q (kW)</b>	<b>Q hasta T<sub>a</sub> (kW)</b>
542	0,00329	0,1427	-	0
543	0,00329	0,1423	0,1138	0,1138
544	0,00328	0,1420	0,1420	0,2558
545	0,00327	0,1416	0,1416	0,3974
546	0,00326	0,1413	0,1413	0,5387
547	0,00326	0,1410	0,1410	0,6797
548	0,00325	0,1406	0,1406	0,8204
549	0,00324	0,1403	0,1403	0,9607
550	0,00323	0,1400	0,1400	1,1007
551	0,00323	0,1397	0,1397	1,2404
552	0,00322	0,1394	0,1394	1,3798
553	0,00321	0,1391	0,1391	1,5189
554	0,00321	0,1388	0,1388	1,6577
555	0,00320	0,1385	0,1385	1,7961
556	0,00319	0,1382	0,1382	1,9344
557	0,00319	0,1379	0,1379	2,0723
558	0,00318	0,1376	0,1376	2,2099
559	0,00317	0,1374	0,1374	2,3473
560	0,00317	0,1371	0,1371	2,4843
561	0,00316	0,1368	0,1368	2,6211
562	0,00315	0,1365	0,1365	2,7577
563	0,00315	0,1363	0,1363	2,8939

*Tabla A39: Cálculo del calor a aportar por el calentador (final)*

<b>Calor necesario para que la alimentación alcance la temperatura de reacción</b>				
<b>Temperatura (°C)</b>	<b>Cp (kJ/g·°C)</b>	<b>Capacitancia (kW/°C)</b>	<b>Incremento de Q (kW)</b>	<b>Q hasta T<sub>2</sub> (kW)</b>
632	0,00286	0,1238	0,1238	11,8038
633	0,00286	0,1237	0,1237	11,9275
634	0,00285	0,1236	0,1236	12,0511
635	0,00285	0,1235	0,1235	12,1745
636	0,00285	0,1233	0,1233	12,2979
637	0,00285	0,1232	0,1232	12,4211
638	0,00284	0,1231	0,1231	12,5442
639	0,00284	0,1230	0,1230	12,6672
640	0,00284	0,1229	0,1229	12,7901
641	0,00284	0,1228	0,1228	12,9129
642	0,00283	0,1227	0,1227	13,0356
643	0,00283	0,1226	0,1226	13,1582
644	0,00283	0,1225	0,1225	13,2806
645	0,00283	0,1224	0,1224	13,4030
646	0,00282	0,1223	0,1223	13,5253
647	0,00282	0,1222	0,1222	13,6474
648	0,00282	0,1221	0,1221	13,7695
649	0,00282	0,1220	0,1220	13,8914
650	0,00281	0,1219	0,1219	14,0133

Como se observa en la anterior Tabla A39, el calentador debe suministrar 14,013 kW a la corriente de alimentación para que esta entre al reactor a la temperatura de operación, es decir, 650 °C. Como ya se ha mencionado, este calor se aportará a la corriente de alimentación previa entrada de la misma en el reactor mediante una caldera o una resistencia.

## **6. DIMENSIONAMIENTO DE EQUIPOS AUXILIARES**

En el presente apartado se pretende detallar la selección del resto de equipos principales que, junto con el reactor tubular y el intercambiador de calor, componen la planta de GASC de fenol que se ha diseñado. Los equipos principales son los siguientes:

### **6.1 BOMBA DE ALIMENTACIÓN A ALTA PRESIÓN**

La planta precisa de una bomba que se encargue de suministrar la presión y velocidad suficiente al caudal de alimentación para que la reacción tenga lugar en las condiciones de diseño. Evidentemente, la bomba seleccionada debe ser de alta presión con las dificultades y materiales de construcción que esto conlleva. Se descartan varios tipos de bombas como las centrífugas debido a que el diseño de las mismas favorece la impulsión de grandes caudales a presiones pequeñas. La bomba debe ser de pistón o de diafragma, al ser estas especialmente útiles para impulsar fluidos a altas presiones.

Para su dimensionamiento, se empleará la ecuación de Bernoulli modificada para conocer la carga necesaria a aportar al fluido:

$$\frac{P_2 - P_1}{\rho g} + (Z_2 - Z_1) + \frac{V_2^2 - V_1^2}{2g} + h_f = h_{A, NETA} \quad (33)$$

Siendo:

$$\frac{P_2 - P_1}{\rho g} \rightarrow \text{Carga necesaria aportar para aumentar la presión}$$

$$(Z_2 - Z_1) \rightarrow \text{Carga necesaria para aumentar la altura}$$

$$\frac{V_2^2 - V_1^2}{2g} \rightarrow \text{Carga necesaria para aumentar la velocidad}$$

$$h_f \rightarrow \text{Pérdida de carga debida a la fricción y accesorios}$$

$$h_{A, NETA} \rightarrow \text{Carga total necesaria para pasar del punto 1 al 2}$$

La cinética de reacción se ve afectada por un descenso de la presión, esta se vuelve más rápida, pero en la distribución de productos el hidrógeno pierde peso, por lo que la bomba debe diseñarse para que la presión del fluido a lo largo del reactor sea la más cercana posible a la presión de diseño. Además, el reactor es el equipo más largo y con más giros, por lo que previsiblemente en él tendrá lugar la mayor parte de la pérdida de carga de la corriente, por tanto, en función de la magnitud de dicha pérdida de carga se seleccionará la presión de la bomba. Si la pérdida de carga es muy grande, lo más adecuado para que la cinética calculada sea correcta es que el fluido entre a una presión ligeramente superior a la de diseño (25 MPa) y abandone el reactor a una presión ligeramente inferior. Si, por el contrario, la pérdida de carga conjunta entre el reactor y el intercambiador es relativamente baja, no es tan necesario que la presión de diseño sea la media entre la presión de la corriente a la entrada y salida del reactor.

A continuación, se muestra la ecuación 34 que define la pérdida de carga en una conducción por el rozamiento del fluido (ecuación de Darcy):

$$h_f = f \cdot \left(\frac{L}{D}\right) \cdot \left(\frac{V^2}{2 \cdot g}\right) \quad (34)$$

Siendo “f” el factor de fricción o factor de Darcy, el cual puede calcularse gráficamente o mediante la ecuación de Haaland (ecuación 36):

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -1,8 \cdot \log \left[ \left(\frac{\varepsilon/D}{3,7}\right)^{1,11} + \frac{6,9}{Re} \right] \quad (35)$$

Siendo “ε” la rugosidad de la tubería. A continuación, se muestra la Tabla A40 procedente del libro “Transferencia de calor y masa” de Yunus Cengel, que muestra los valores de rugosidad para distintos materiales:

*Tabla A40: Valores de rugosidad para distintos materiales, Cengel*

Material	Rugosidad, ε	
	ft	mm
Vidrio, plástico	0	0
Concreto	0.003-0.03	0.9-9
Duela de madera	0.0016	0.5
Caucho alisado	0.000033	0.01
Tubo de cobre o latón	0.000005	0.0015
Hierro fundido	0.00085	0.26
Hierro galvanizado	0.0005	0.15
Hierro forjado	0.00015	0.046
Acero inoxidable	0.000007	0.002
Acero comercial	0.00015	0.045

El Inconel 625 posee más de un 10,5% de cromo (22%) siendo, por tanto, considerado un acero inoxidable con una rugosidad de 0,002 mm como se muestra en la anterior Tabla A40.

En cuanto al valor del Re, se debe tener en cuenta que no es constante durante toda la longitud del reactor, ya que la temperatura desciende. Sin embargo, este descenso es de tan solo 20 °C y tanto el caudal másico como la sección se mantienen constantes a lo largo del reactor, por lo que no se espera un gran cambio del Re de la corriente. A continuación, se muestra el cálculo del Reynolds a la entrada y a la salida del reactor:

$$Re_{\text{entrada}} = \frac{4 \cdot Q \cdot \rho_{(650^{\circ}\text{C})}}{\pi \cdot D_{\text{int}} \cdot \mu_{(650^{\circ}\text{C})}} = \frac{4 \cdot 0,0000425 \cdot 15,93 \cdot 64,81}{\pi \cdot 0,03818 \cdot 3,6439 \cdot 10^{-5}} = 40156,4$$

$$Re_{\text{salida}} = \frac{4 \cdot Q \cdot \rho_{(630^{\circ}\text{C})}}{\pi \cdot D_{\text{int}} \cdot \mu_{(630^{\circ}\text{C})}} = \frac{4 \cdot 0,0000425 \cdot 15,93 \cdot 67,003}{\pi \cdot 0,03818 \cdot 3,5685 \cdot 10^{-5}} = 42392,2$$

Los valores a la entrada y salida son muy similares, por lo que se realizará el cálculo con el valor promedio de ambos:

$$Re_{\text{promedio}} = \frac{Re_{\text{entrada}} + Re_{\text{salida}}}{2} = \frac{40156,4 + 42392,2}{2} = 41274,4$$

Una vez conocido este valor ya puede resolverse la ecuación 35:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -1,8 \cdot \log \left[ \left( \frac{0,002/38,18}{3,7} \right)^{1,11} + \frac{6,9}{41274,4} \right] = 6,779$$

Por tanto:

$$f = \frac{1}{6,779^2} = 0,0218$$

Tal y como se muestra en el documento “Planos” del presente proyecto, el reactor está constituido por 404,88 metros en los que se incluyen 24 codos de radio largo. A continuación se muestra en la siguiente Tabla A41 la longitud equivalente para algunos accesorios comunes:

*Tabla A41: Longitud equivalente de algunos accesorios comunes [30]*

<b>Accesorio</b>	<b>K</b>	<b>L<sub>eq</sub>/D</b>
Válvula de globo, abierta	10	350
Válvula de ángulo, abierta	5	175
Empalme en T normal	1,8	67
Codo de radio corto	0,9	32
Codo de radio medio	0,75	27
Codo de radio largo	0,60	20
Codo de 45°	0,42	15
Válvula de compuerta		
- Completamente abierta	0,19	7
- entreabierto	2,06	72

Para el caso de los codos de radio largo, la longitud equivalente entre el diámetro cuenta con un valor de 20. Una vez conocidos todos los parámetros, se resuelve la ecuación 34:

$$h_f = f \cdot \left( \frac{L}{D} \right) \cdot \left( \frac{V^2}{2 \cdot g} \right) = 0,0218 \cdot \left( \frac{402}{0,03818} + 20 \cdot 24 \right) \cdot \left( \frac{0,592^2}{2 \cdot 9,81} \right) = 4,29 \text{ metros}$$

El valor de la pérdida por el rozamiento a través del reactor es mínimo, puesto que corresponde a 0,421 bar, es decir, una pérdida del 0,168 % de la presión a la entrada.

El intercambiador de calor es un caso distinto, debido a que hay una diferencia de temperatura muy grande entre la entrada y la salida de cada corriente, lo que implica grandes cambios en el Reynolds y la velocidad lineal. Sin embargo, no se espera que la pérdida de carga sea muy elevada, puesto que posee una longitud mucho menor que el reactor y la pérdida de carga de este último es prácticamente despreciable. Como se ha mencionado, las propiedades varían en gran medida de un punto a otro, por lo que no puede realizarse el cálculo global a la longitud total. Sin embargo, para el diseño del intercambiador ya se determinó en una hoja de cálculo en Excel las propiedades de cada corriente, así como la velocidad lineal y el número de Reynolds, por lo que se ampliará dicha hoja de cálculo para obtener la pérdida de carga por incrementos de longitud.

El problema reside en que la longitud del intercambiador y la temperatura del fluido no son proporcionales y no se conoce la temperatura a la que se encuentra la corriente en una posición dada. Por todo esto, se realizará un cálculo aproximado a partir del tamaño del reactor necesario para que la corriente caliente salga a una temperatura dada. Se tomará ese tamaño como el punto en el que la corriente se encuentra a esa temperatura y se calculará la pérdida de carga de un tamaño a otro y luego se realizará un sumatorio de todas las pérdidas de carga en los 30 metros totales.

A continuación, se muestra la Tabla A42, correspondiente a una fracción de la realizada en la hoja de cálculo de Excel, por medio de la cual se ha calculado la pérdida de carga en el IC:

*Tabla A42: Parte del cálculo de la pérdida de carga en el IC para la corriente de productos*

Tamaño (m)	Temperatura (°C)	Factor de fricción	hf (m)	hf total (m)
30,198	79	0,028	0,0269	2,575
29,621	80	0,028	0,0263	
29,059	81	0,028	0,0251	
28,516	82	0,028	0,0246	
27,996	83	0,028	0,0238	
27,489	84	0,028	0,0229	
27,003	85	0,028	0,0224	
26,528	86	0,028	0,0215	
26,068	87	0,028	0,0211	
25,627	88	0,027	0,0205	
25,194	89	0,027	0,0197	
24,779	90	0,027	0,0194	
24,372	91	0,027	0,0186	
23,977	92	0,027	0,0184	
23,596	93	0,027	0,0176	
23,223	94	0,027	0,0175	
22,864	95	0,027	0,0169	
22,510	96	0,027	0,0164	

La pérdida de carga de la corriente de productos tras su paso por el IC es de 2,575 metros de agua, un valor muy bajo en comparación con la presión a la que entra la corriente en el reactor.

De la misma forma se realiza el cálculo para la pérdida de carga de la corriente de alimentación a través del IC para la que se debe utilizar el diámetro hidráulico en vez del de la tubería exterior. La pérdida de carga obtenida es de 1,644 metros de columna de agua.

Otras zonas en las que se produciría cierta pérdida de carga son las conducciones auxiliares:

- 30 metros de conducción de la corriente de alimentación desde el tanque de almacenamiento hasta el IC y que contará con 4 codos de radio largo y una válvula antirretorno.
- 20 metros de conducción a través de la cual se realizará el último calentamiento de la corriente caliente y que contará con 4 codos de radio largo y una sección tronco-cónica de ensanchamiento tras el primer codo.
- 2 metros de conducción que unen el efluente del reactor y el IC que contará con 2 codos de radio largo y una sección tronco-cónica de estrechamiento gradual para el paso de 2" a 3/4" entre ambos codos.

El cálculo de la pérdida de carga en estas conducciones se realizará con las propiedades de la corriente a la temperatura media, puesto que no existen grandes saltos de temperatura.

Para el caso de los primeros 30 metros, la bomba estará situada a los 10 metros y tras dos codos. Sin embargo, la velocidad lineal es de 0,069 m/s a lo largo de esta conducción, por lo que la pérdida de carga será totalmente despreciable.

En cuanto a los últimos 20 metros, no sería lógico una pérdida de carga grande más allá de que se trata de una corriente con parte ascendente, pero el cambio de altura no se está contabilizando aún. Sí que sería posible que por limitaciones en la disposición espacial o por requerimientos de funcionamiento y seguridad por la caldera, se precisen de más de 20 metros de conducción. Además, son necesarios más accesorios de los que se han contabilizado anteriormente como son secciones tronco-cónicas de ensanchamiento y estrechamiento necesarias para algunos equipos, ya que se comercializan para un diámetro máximo de 1/2", como ocurre con la válvula de control, la antirretorno o el disco de ruptura. Por todo esto, se atribuirá una pérdida de carga de 2,5 metros al flujo a través de la conducción de calentamiento final y los 30 primeros metros hasta el IC.

En cuanto a la unión entre el reactor y el IC, el primer codo supone una pérdida de carga de 8 mm, por lo que es de esperar que esta conducción sea despreciable para el cómputo global, al igual que ocurría con los primeros 30 metros.



En total, la pérdida de carga a lo largo del sistema es:

$$4,29 + 2,575 + 1,644 + 2,5 = 11,01 \text{ metros}$$

Para el cálculo de la presión a la que funcionará la bomba se atenderá a la pérdida de carga previa a la entrada al reactor, es decir, 4,144 metros y la pérdida en el flujo a través del mismo, 4,29 metros. Por todo esto, la bomba trabajará para que el fluido entre en el reactor a 250,5 bar. La carga que debe aportar la bomba se calculará mediante la ecuación de Bernoulli.

El reactor tiene una altura de 3 metros sin contar con el aislante y la parte inferior se situará a una altura de un metro para facilitar la limpieza y evitar posibles problemas por derrames o cualquier imprevisto a nivel de suelo. La diferencia de altura entre el flujo que sale de los tanques de almacenamiento (punto 1) y la entrada al reactor (punto 2) es de 4 metros. El cambio de energía cinética es despreciable, ya que en ningún punto la velocidad lineal se vuelve muy elevada.

A continuación, se muestra la resolución de la ecuación 33 para el cálculo que debe aportar la bomba para cumplir con los objetivos impuestos:

$$h_{A,NETA} = \frac{(250,5 - 1,01) \cdot 10^5}{997 \cdot 9,81} + (4 - 0) + (3,144 + 4,29) = 2564,86 \text{ m}$$

Para el cálculo de la potencia de la bomba necesaria se atenderá a la siguiente ecuación:

$$\text{Potencia} = \frac{h_{A,NETA} \cdot (\rho \cdot Q_v) \cdot g}{\eta}$$

Suponiendo un rendimiento del 80%:

$$\text{Potencia} = \frac{2559,7 \cdot (997 \cdot 0,0000425) \cdot 9,81}{0,8} = 1332 \text{ W} \rightarrow 1,33 \text{ kW}$$

Cualquier bomba con una potencia superior a 1,33 kW y que sea capaz de suministrar un caudal de 153 L/h y 250,25 bar es una potencial opción. Atendiendo al catálogo de bombas ofertado por la empresa “HAWK International” [31] se observa que la mayoría de bombas están disponibles para determinados diámetros de entrada y salida a la misma, no siendo ninguna apta para conducciones de entrada superiores a 1 1/4”. Por tanto, se buscará una bomba que cumpla con las características necesarias y que su salida sea para un diámetro nominal de 1/2” de forma que no sea necesaria una sección de estrechamiento justo tras la bomba para la colocación de una válvula antirretorno que, como se explicará más adelante en el presente anexo, no se comercializan con un diámetro superior a 1/2”.

Finalmente, se ha seleccionado la serie de bombas XLTI del catálogo de bombas de la empresa “HAWK International” por contar con la capacidad de suministrar una presión de hasta 300 bar y tener un diámetro de salida de 1/2”. En concreto, se trata de la bomba XLT1530I por ser la que menor

potencia consume de la serie de bombas seleccionada. En la siguiente Tabla A43 se detallan las principales características de la serie de bombas en cuestión:

*Tabla A43: Detalles de la serie de bombas XLTl, HAWK International*

Pump Pompa	Pressure Pressione		Volume Portata				RPM giri/min		Power Potenza			
	bar	PSI	l/min		GPM		50 Hz	60 Hz	HP		kW	
			50 Hz	60 Hz	50 Hz	60 Hz			50 Hz	60 Hz	50 Hz	60 Hz
XLT1530I	300	4350	15	18	3,96	4,75	1450	1740	11,5	13,8	8,5	10,2
XLT1830I	300	4350	18	22	4.8	5.8	1450	1740	13.7	16.4	10.1	12.1
XLT2230I	300	4350	22	26	5.8	7	1450	1740	16.6	19.9	12.2	14.6
XLT2530I	300	4350	25	30	6.6	7.9	1450	1740	19.2	23.0	14.1	16.2
XLT2730I	300	4350	27	32	7.1	8.5	1450	1740	20.5	24.6	15.1	18.1

No ha sido posible obtener la curva característica de la bomba, pero el caudal máximo que puede impulsar es de 900 L/h, por lo que con total seguridad será capaz de impulsar un caudal de 153 L/h a la presión necesaria. Tiene una potencia máxima de 10,2 kW, de forma que también cumple este requisito con creces.

La entrada a la misma debe ser una conducción con un diámetro nominal de 3/4", por lo que este será el tamaño de la tubería que una los tanques de alimentación con la bomba.

## 6.2 TANQUES DE ALIMENTACIÓN

Tal y como se puede comprobar en la "Memoria" y se ha explicado anteriormente, la alimentación ya se encuentra a la concentración de fenol requerida en el tanque de alimentación. Como puede observarse en el diagrama de flujo del proceso, se ha diseñado la planta con dos tanques de almacenamiento, es decir, el tanque se encuentra por duplicado. Esta decisión se tomó, principalmente, por dos motivos:

- Debido a que la planta es a escala piloto, no se pretende tener equipos demasiado grandes, de forma que se va a rellenar un tanque mientras se usa el otro.
- Por seguridad siempre está bien tener los equipos de menor coste por duplicado para evitar cualquier fallo en el sistema.

De esta forma, si un tanque o la línea de abastecimiento a la bomba proveniente de uno de los tanques se ve afectada por un problema, la planta puede seguir funcionando correctamente. Para ofrecer mayor consistencia a esta idea, cada tanque tendrá la capacidad suficiente como para permitir veinticuatro horas de operación, es decir, 3672 litros. Finalmente, se ha seleccionado un depósito vertical con patas de la empresa "Hidroserver" que cuenta con una capacidad de 5000 litros y con la descarga del mismo

casi a nivel del suelo. A continuación, se muestra en la Figura A51 el propio tanque y una tabla con las medidas y precios de las distintas opciones comercializadas por la empresa:



Capacidad (L)	Diámetro (m)	Altura (m)	Precio (€)
5000	1,50	3,28	1.137
6000	1,50	3,84	1.170
8000	2,00	3,16	1.329
10000	2,00	3,80	1.550
12000	2,45	3,30	1.584
20000	2,45	4,99	2.363

*Figura A51: Depósito vertical con patas ofertado por “Hidroserver” [32]*

El depósito seleccionado cumple con los requisitos establecidos y permitirá obtener la corriente de alimentación de uno de los tanques cada día, estando el otro disponible para su recarga tanto con la corriente a tratar como con el agua necesaria para alcanzar la concentración deseada en el reactor.

### **6.3 OTROS EQUIPOS AUXILIARES**

En el presente apartado se expondrán el resto de componentes necesarios para el correcto funcionamiento de la planta, pero que su dimensionamiento no entra en las competencias del proyecto diseñado.

- **Caldera:** Como ya se indicó anteriormente se precisa de una caldera que suministre el calor necesario para que la corriente de alimentación, tras abandonar el IC, alcance la temperatura de entrada al reactor. Asimismo, esta caldera debe contar con la capacidad de calentar la corriente para el arranque del sistema, es decir, cuando aún no hay corriente de productos que permita el precalentamiento de la alimentación. Esto se logrará mediante un arranque gradual en el que el caudal se va aumentando con el tiempo hasta alcanzar el de operación o instalando una caldera que permita generar mucho más calor del que se precisa en la operación normal con el objetivo de calentar esta corriente inicial.

- **Termopares:** Con el objetivo de llevar a cabo un correcto control de la temperatura a lo largo del sistema se precisa de la utilización de varios termopares. Después de una búsqueda sobre los termopares más utilizados industrialmente, se decidió utilizar termopares de tipo K o N debido al amplio rango de temperatura y estabilidad de los mismos. Los termopares de tipo N presentan mejores características y un mayor costo que los de tipo K, por lo que sería necesario estudiar si merece la pena su uso [33].
- **Sensores de presión:** Para poder llevar a cabo un correcto control de la presión dentro del sistema se instalarán distintos transmisores de presión a lo largo de la planta. Se colocará un sensor de presión justo tras la bomba, uno a la salida del reactor y, por último, se instalará otro justo antes de la BPR.
- **Intercambiador de calor para el ACS:** La corriente caliente abandona el intercambiador de calor a 80 °C, por lo que tiene una temperatura lo suficientemente alta como para emplearla en la generación de agua caliente sanitaria (ACS) como ya se comentó anteriormente. Para ello, es necesario un IC en el que entre, además de esta corriente a 80 °C, agua de red a 25 °C lo que permita calentar esta corriente hasta los 60-65 °C y mantenerla en un tanque para cuando sea necesario su uso.
- **Válvula BPR:** Las válvulas reguladoras de presión o BPR, por sus siglas en inglés, *Back Pressure Regulator*, son dispositivos que logran el control automático de la presión sin una fuente externa de alimentación. Cuando la presión del fluido en el proceso en la entrada de la BPR excede el punto de ajuste, el regulador se abre para aliviar este exceso de presión. Esta válvula se encargará de controlar la presión del sistema para que esta se encuentre en 250 bar. El problema es que no se comercializan BPR para altas presiones con diámetros nominales mayores de 1/2" y la conducción en cuestión es de 3/4", de forma que se colocará una sección tronco-cónica de estrechamiento previa entrada en la BPR. En cuanto a BPR comerciales se seleccionará la válvula VRT100 presente en el catálogo de la empresa "Emiltec" que cuenta con las características que se presentan en la siguiente Tabla A44:

*Tabla A44: Características de la válvula VRT100 de la empresa "Emiltec" [34]*

Presión	320 bar
Caudal	100 lts/min
Temperatura máx	90 °C
Conexión	1/2" H

- **Separador G-L:** Una vez que la corriente de productos se encuentre a una temperatura ligeramente superior a la ambiental y a presión atmosférica, se procederá con la entrada de la misma en un separador G-L que permita obtener la corriente de productos gaseosos. Esta última corriente puede entrar en otro separador con el fin de generar otras corrientes concentradas en los gases con valor energético aprovechable, como son el hidrógeno y el metano. Sin embargo, no es competencia del presente TFG el diseño de los separadores necesarios.
- **Válvulas antirretorno:** Estas válvulas se instalan cuando existe la necesidad de mantener la presión en una tubería que está en funcionamiento, al mismo tiempo que se evita que el líquido que circula por ella vuelva al punto por donde se suministra. La planta piloto diseñada en el presente TFG contará con una válvula antirretorno situada después de la bomba que aporta la presión a la corriente. Obviamente, deberá ser capaz de soportar la presión de trabajo (algo superior a 250 bar en esta zona), pero, no existe ningún requerimiento en cuanto a la temperatura de funcionamiento, puesto que la corriente se encuentra casi a temperatura ambiente. Al igual que ocurría con la BPR, el diámetro nominal más grande para el que se fabrican válvulas antirretorno que aguanten presiones tan elevadas es de 1/2", siendo esta la razón de que se buscase una bomba preparada para una conducción de salida de este tamaño.
- **Válvula de control de presión:** Son válvulas con un orificio de área modificable que se abre o cierra, modificando así la pérdida de carga del fluido según la señal que reciba del controlador de presión.
- **Caudalímetro:** Existe una necesidad imperiosa de que el caudal de operación sea el mismo que el de diseño, puesto que, de no ser así, se estaría perdiendo productividad por contar con un caudal más pequeño del óptimo o no se alcanzaría la conversión buscada para el fenol. Solo sería necesario un caudalímetro que se encontrará antes de la bomba y se medirá el caudal, por tanto, en condiciones ambientales. Al estar dispuesto de esta forma no sería necesario que el caudalímetro soporte la presión de operación, pero, sí debe contar con una alta precisión, puesto que pequeñas variaciones del caudal en estas condiciones, implican grandes cambios en condiciones supercríticas.
- **Discos de ruptura:** Los discos de ruptura son, junto con las válvulas de seguridad, las protecciones contra los aumentos de presión que se utilizan con más frecuencia en las instalaciones industriales. Los discos de ruptura son dispositivos de seguridad con zonas de rotura que se dejan vencer frente a una presión preestablecida y se emplean en múltiples aplicaciones para el alivio de presión frente a un aumento repentino de la misma. Los discos de ruptura sirven también para mantener la integridad de los equipos principales en situaciones indeseables de

aumento de la presión. Es un accesorio que apenas necesita mantenimiento y tiene un coste muy bajo comparado con los daños que puede llegar a evitar. La planta contará con tres discos de ruptura, uno tras la bomba y los otros dos a la entrada y salida del reactor, los cuales deberán vencerse frente a una presión ligeramente inferior a 275 bar.

- **Válvulas de compuerta:** Como se ha indicado anteriormente, el sistema contará con dos tanques para el almacenamiento de la alimentación, por lo que existe la necesidad de controlar de cuál tanque provendrá la corriente de alimentación en cada momento. Esto se realizará por medio de válvulas de compuerta, que son válvulas con la función de dejar pasar el flujo con poca pérdida de carga añadida o impedirlo por completo cuando la situación lo requiera. Se colocará una válvula a la salida de cada tanque de alimentación.

## **7. BIBLIOGRAFÍA**

- [1] *Libro del Web de Química del NIST*. Consultado Marzo 21, 2023, de <https://webbook.nist.gov/chemistry/>
- [2] Huelsman, C. M., & Savage, P. E. (2013). Reaction pathways and kinetic modeling for phenol gasification in supercritical water. *The Journal of Supercritical Fluids*, 81, 200–209. <https://doi.org/10.1016/J.SUPFLU.2013.05.012>
- [3] Huelsman, C. M., & Savage, P. E. (2012). Intermediates and kinetics for phenol gasification in supercritical water. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 14(8), 2900–2910. <https://doi.org/10.1039/C2CP23910H>
- [4] Yong, T. L. K., & Matsumura, Y. (2014). Kinetics analysis of phenol and benzene decomposition in supercritical water. *The Journal of Supercritical Fluids*, 87, 73–82. <https://doi.org/10.1016/J.SUPFLU.2013.12.018>
- [5] Weiss-Hortala, E., Kruse, A., Ceccarelli, C., & Barna, R. (2010). Influence of phenol on glucose degradation during supercritical water gasification. *The Journal of Supercritical Fluids*, 53(1–3), 42–47. <https://doi.org/10.1016/J.SUPFLU.2010.01.004>
- [6] Goodwin, A. K., & Rorrer, G. L. (2008). Conversion of glucose to hydrogen-rich gas by supercritical water in a microchannel reactor. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 47(12), 4106–4114. [https://doi.org/10.1021/IE701725P/ASSET/IMAGES/IE-2007-01725P\\_M006.GIF](https://doi.org/10.1021/IE701725P/ASSET/IMAGES/IE-2007-01725P_M006.GIF)
- [7] Fernández, J. Pelaz, de Salamanca, U., De, F., Químicas, C., De, D., & Física, Q. (2016). *Regeneración con fluidos supercríticos de fibras de carbón activas saturadas con fenol*. <https://doi.org/10.14201/GREDOS.133008>
- [8] Ingeniería de las reacciones químicas, Octave Levenspiel, Editorial Limusa, 3ª edición.
- [9] Estimación de equilibrio de fases en tuberías de producción de gas [http://ve.scielo.org/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0798-40652011000400010](http://ve.scielo.org/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0798-40652011000400010) Consultado Abril, 22, 2023.
- [10] Acero Inoxidable 316 Y 316L. Consultado Abril 15, 2023, de [https://www.materialwelding.com/acero-inoxidable-316-y-316l/?utm\\_content=cmp-true](https://www.materialwelding.com/acero-inoxidable-316-y-316l/?utm_content=cmp-true)
- [11] Hastelloy C276 Bar ASTM B574 N10276 - Emilymetal.com. Consultado Abril 15, 2023, de <https://www.emilymetal.com/hastelloy-c276-bar-astm-b574-n10276-2-4819.html/>
- [12] Níquel y Aleaciones de Níquel - Mega Mex. Consultado Abril 16, 2023, de <https://megamex.com/es/niquel/>
- [13] Inconel® 600 Harald Pihl. Consultado Abril 16, 2023, de <https://www.haraldpihl.com/es/Productos/heat-resistant-alloys/inconel-600/>
- [14] Inconel® 625 | Harald Pihl. Consultado Abril 16, 2023, de <https://www.haraldpihl.com/es/Productos/Aleaciones-de-niquel/inconel-625/>
- [15] ASME B31.3 Process Piping 2018: Tuberías de refinerías y plantas químicas.

- [16] ASTM B564-22 2022: Standard Specification for Nickel Alloy Forgings
- [17] Catálogo - Tuberías - Tubos, Bridas, Accesorios y Válvulas Inoxidables. Consultado Abril 8, 2023, de <https://www.tubinox.com/catalogo/category/4-tuberias>
- [18] FIBRA CERÁMICA Ficha Técnica Descripción. Consultado Mayo 8, 2023, de [www.patsa.net](http://www.patsa.net)
- [19] Resistencia térmica. Material vs Calor. Consultado Mayo 8, 2023, de <https://stacbond.com/resistencia-termica/>
- [20] Guía técnica: diseño y cálculo del aislamiento térmico de conducciones, aparatos y equipos | Idae. Consultado Mayo 15, 2023, de <https://www.idae.es/publicaciones/guia-tecnica-diseno-y-calculo-del-aislamiento-termico-de-conducciones-aparatos-y>
- [21] UNE-EN ISO 12241:2010 Aislamiento térmico para equipos de edificación e instalaciones industriales
- [22] Real Decreto 178/2021, de 23 de marzo, sobre el Reglamento de Instalaciones Térmicas en los Edificios.
- [23] Transferencia de Calor y Masa - Yunus A. Cengel, Editorial Mc Graw Hill, 4ª edición.
- [24] U TECH Pipe Section MT 4.0. Consultado Mayo 13, 2023, de <https://www.isover-aislamiento-tecnico.es/productos/u-tech-pipe-section-mt-40>
- [25] U TECH Wired Mat MT 4.0. Consultado Mayo 15, 2023, de <https://www.isover.es/productos/u-tech-wired-mat-mt-40>
- [26] TECH Wired Mat MT 4.2. Consultado Mayo 15, 2023, de <https://www.isover.es/productos/tech-wired-mat-mt-42>
- [27] Código ASME BPV (2010), Sección VIII, subparte 1, 2 y 3
- [28] Código ASME BPV (2019), Sección II, subparte 3
- [29] Real Decreto 865/2003, del 4 de julio, por el que se establecen los criterios higiénico-sanitarios para la prevención y control de la legionelosis
- [30] Mecánica de fluidos en ingeniería, Salvador de las Heras Jimenez, Editor Universidad Politécnica de Cataluña, 1ª edición.
- [31] Bomba XLT1530I, HAWK International. Consultado en Julio 30, 2023, de <https://www.hawkpumps.com/es/productos/29/bombas-de-pistones-de-alta-presion-serie/xlti>
- [32] Venta depósitos de agua | Hidroserver. Consultado en Julio 29, 2023, de <https://www.hidroserver.com/depositos-de-agua-potable/>
- [33] Termopar Tipo K – Información Técnica para Tipo K - TC S.A. Consultado en Julio 29, 2023, de <https://www.tc-sa.es/termopares/tipo-k-termopar.html>
- [34] Válvula bypass alta presión Mecline VRT100 | EMILTEC. Consultado en Agosto 6, 2023, de <https://www.emiltec.com/es/productos/valvulas/valvulas-by-pass-hasta-450-lmin-y-300-bares/64562/vrt-100>

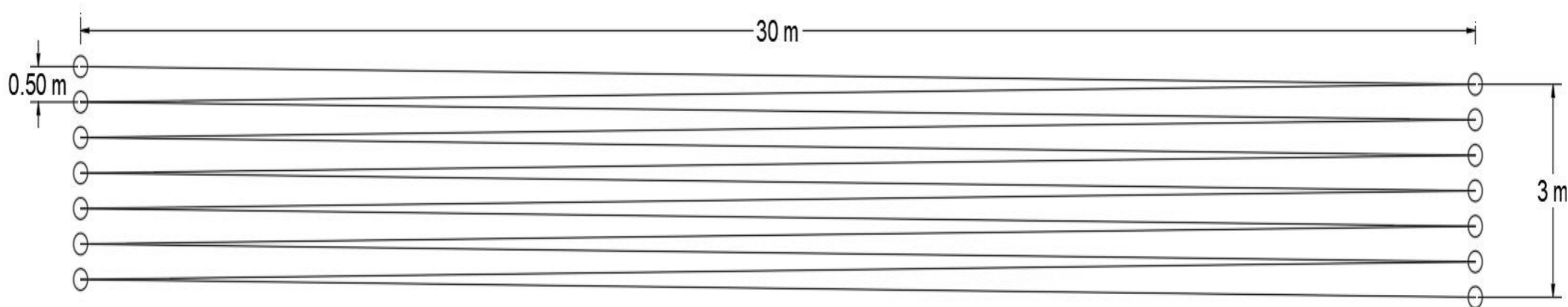



# **DOCUMENTO 3:**

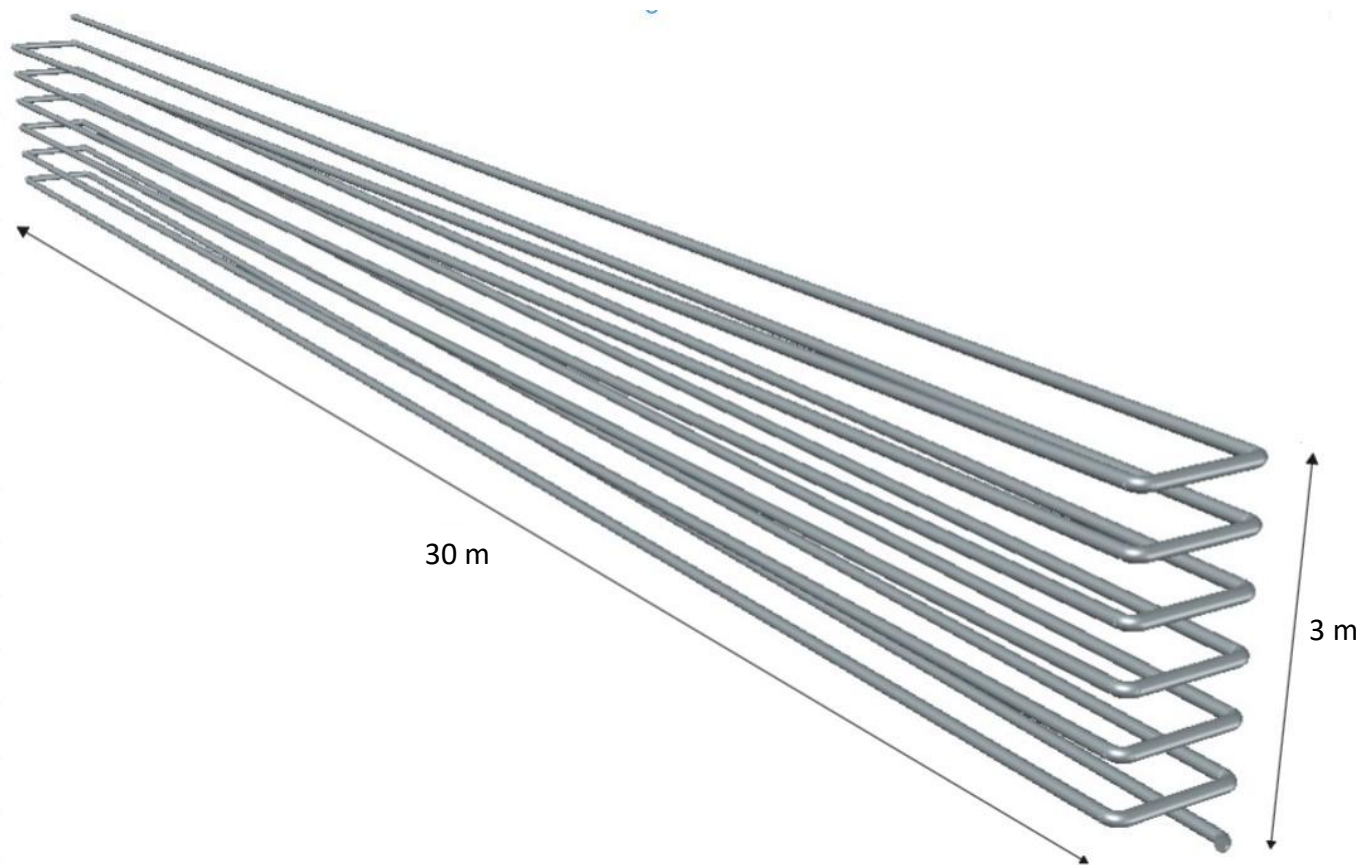
# **PLANOS**

## **ÍNDICE PLANOS**

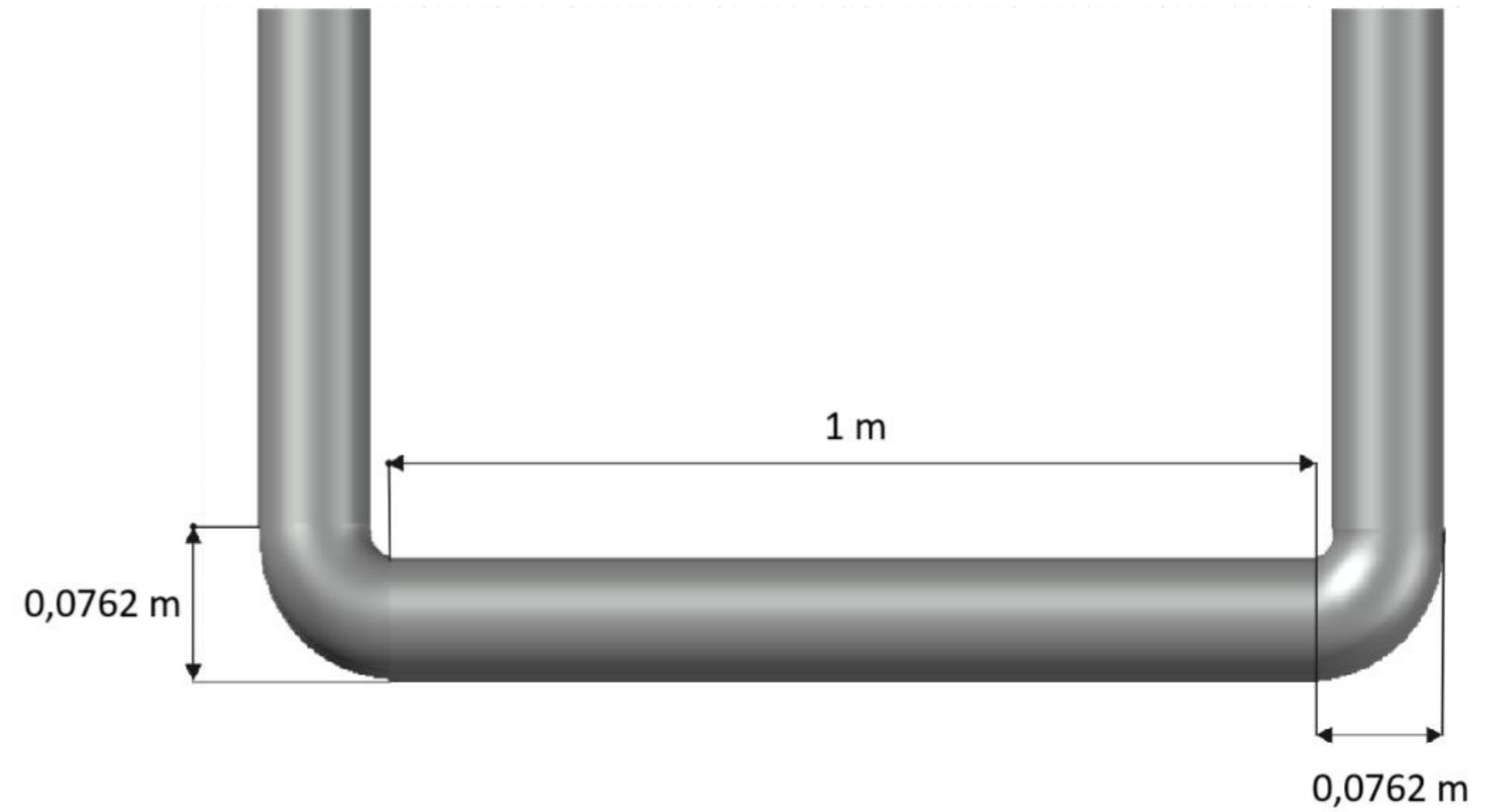
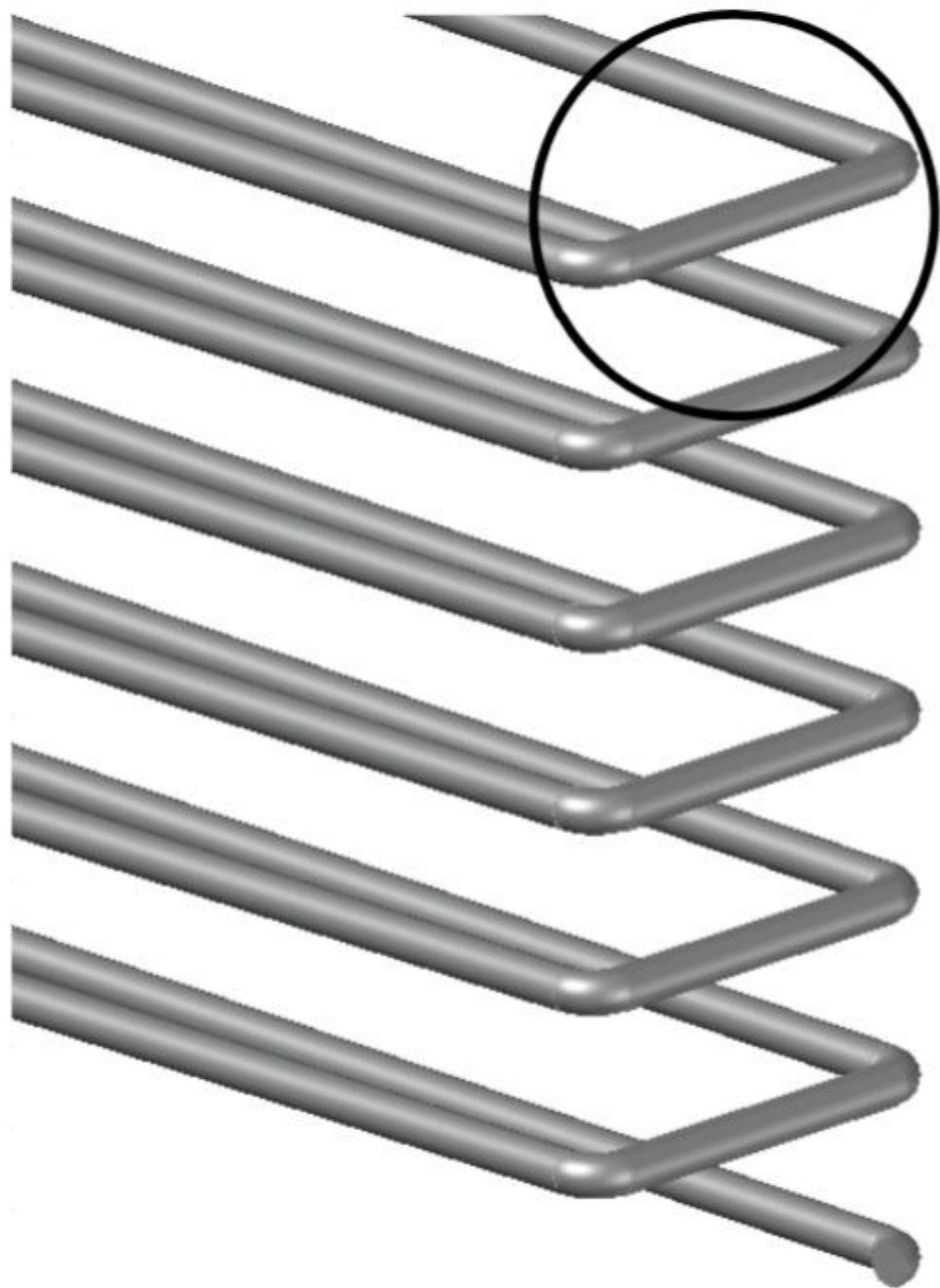
1. ALZADO DEL REACTOR-INCLINACIÓN
2. VISTA GENERAL ESQUINADA DEL REACTOR
3. VISTA AMPLIADA DEL GIRO DEL REACTOR
4. DETALLE DE LAS DIMENSIONES DE LAS CONDUCCIONES DEL REACTOR
5. VISTA EN PLANTA DE LA DISPOSICIÓN DEL AISLANTE TÉRMICO
6. VISTA GENERAL DE LA COMBINACIÓN REACTOR-IC
7. VISTA LATERAL DE LA COMBINACIÓN REACTOR-IC
8. DETALLE DE LAS DIMENSIONES DE LAS CONDUCCIONES DEL IC



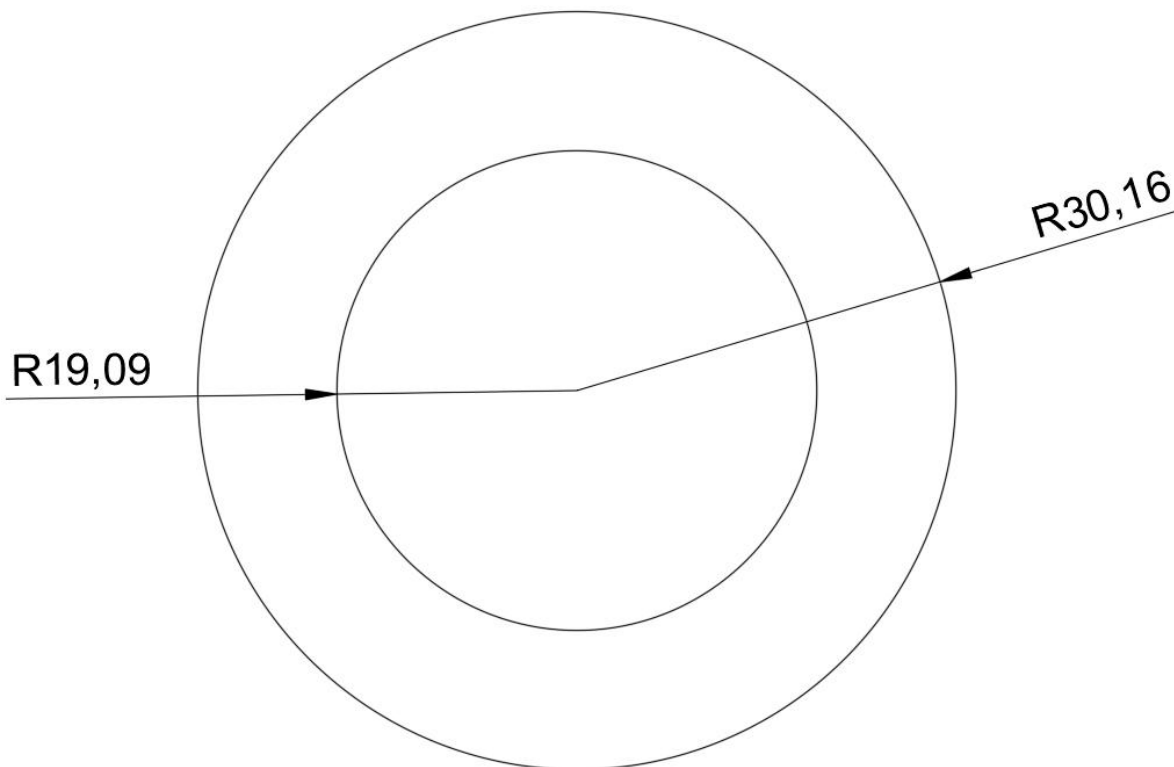
SEPTIEMBRE 2023		SALVADOR MARÍN DE ALBA	INGENIERÍA QUÍMICA
FIRMA 		DISEÑO DE UN REACTOR PARA LA GASIFICACIÓN EN AGUA SUPERCRÍTICA DE SUBPRODUCTOS DEL RECICLADO DE FIBRAS DE CARBONO DE LA INDUSTRIA AERONÁUTICA	
TRABAJO FIN DE GRADO			
FACULTAD DE CIENCIAS UNIVERSIDAD DE CÁDIZ		TÍTULO DEL PLANO: <b>ALZADO DEL REACTOR-INCLINACIÓN</b>	
ESCALA	N/A	NÚMERO DE PLANO:	
FORMATO	<b>A3</b>	<b>TFG-01</b>	



SEPTIEMBRE 2023		SALVADOR MARÍN DE ALBA	INGENIERÍA QUÍMICA
FIRMA 		DISEÑO DE UN REACTOR PARA LA GASIFICACIÓN EN AGUA SUPERCRÍTICA DE SUBPRODUCTOS DEL RECICLADO DE FIBRAS DE CARBONO DE LA INDUSTRIA AERONÁUTICA	
TRABAJO FIN DE GRADO			
FACULTAD DE CIENCIAS UNIVERSIDAD DE CÁDIZ		TÍTULO DEL PLANO:  <b>VISTA GENERAL ESQUINADA DEL REACTOR</b>	
ESCALA	N/A	NÚMERO DE PLANO:  <b>TFG-02</b>	
FORMATO	A4		



SEPTIEMBRE 2023		SALVADOR MARÍN DE ALBA	INGENIERÍA QUÍMICA
FIRMA		DISEÑO DE UN REACTOR PARA LA GASIFICACIÓN EN AGUA SUPERCRÍTICA DE SUBPRODUCTOS DEL RECICLADO DE FIBRAS DE CARBONO DE LA INDUSTRIA AERONÁUTICA	
			
TRABAJO FIN DE GRADO		TÍTULO DEL PLANO:	
FACULTAD DE CIENCIAS UNIVERSIDAD DE CÁDIZ		<b>VISTA AMPLIADA DEL GIRO DEL REACTOR</b>	
ESCALA	N/A	NÚMERO DE PLANO:	
FORMATO	<b>A3</b>	<b>TFG-03</b>	

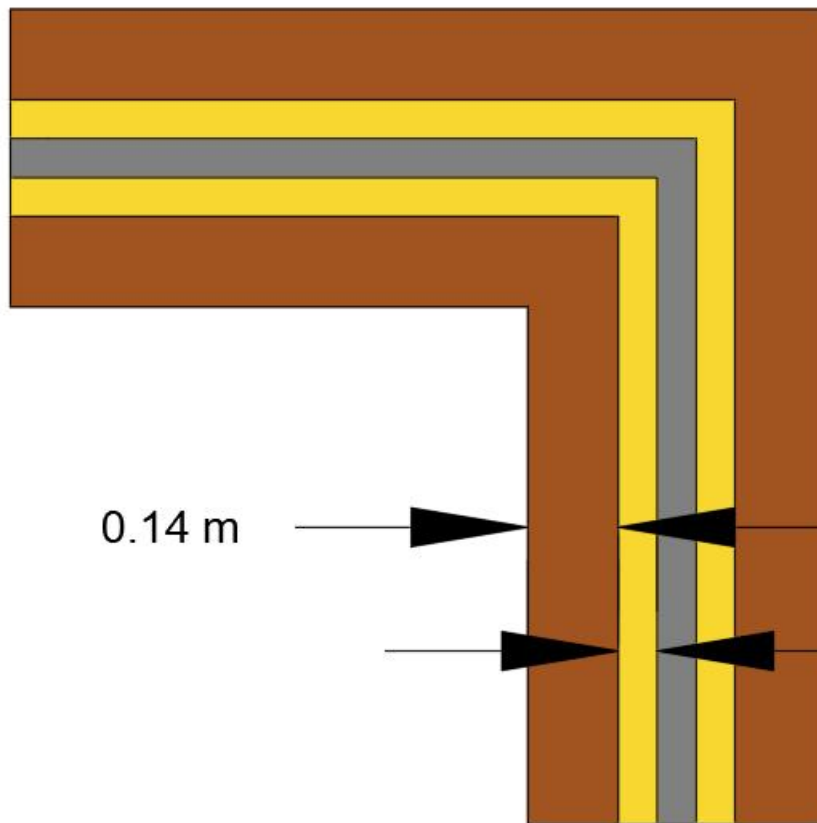


Diámetro externo = 60,32 mm

Diámetro interno = 38,18 mm

Espesor de pared = 11,07 mm

SEPTIEMBRE 2023		SALVADOR MARÍN DE ALBA		INGENIERÍA QUÍMICA	
FIRMA				DISEÑO DE UN REACTOR PARA LA GASIFICACIÓN EN AGUA SUPERCRÍTICA DE SUBPRODUCTOS DEL RECICLADO DE FIBRAS DE CARBONO DE LA INDUSTRIA AERONÁUTICA	
TRABAJO FIN DE GRADO					
FACULTAD DE CIENCIAS UNIVERSIDAD DE CÁDIZ		TÍTULO DEL PLANO: <b>DETALLE DE LAS DIMENSIONES DE LAS CONDUCCIONES DEL REACTOR</b>			
ESCALA	6:1	NÚMERO DE PLANO: <b>TFG-04</b>			
FORMATO	A4				



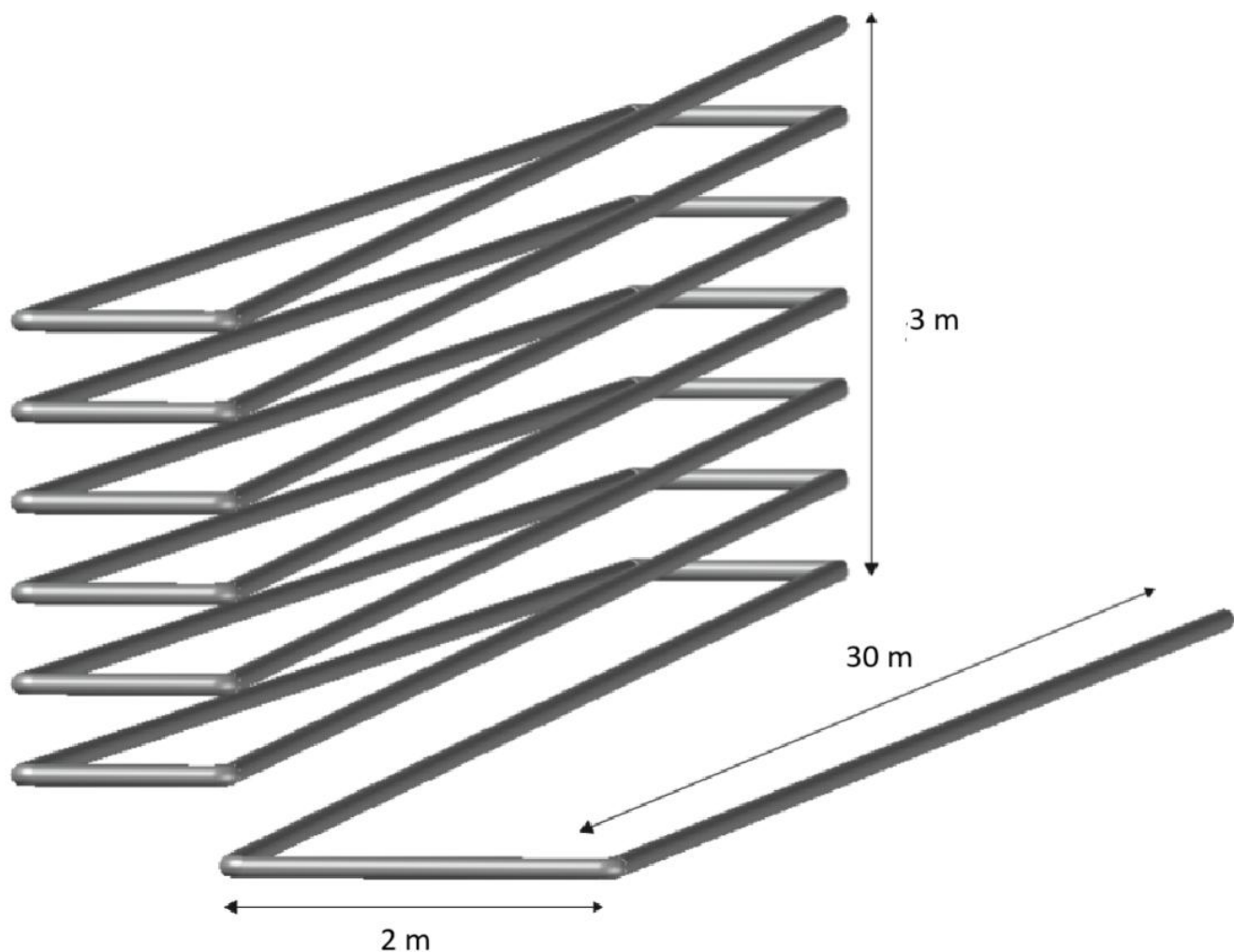
COLOR GRIS: TUBERÍA INCONEL 625


COLOR AMARILLO: COQUILLA DE LANA MINERAL

COLOR MARRÓN: MANTA DE LANA DE ROCA

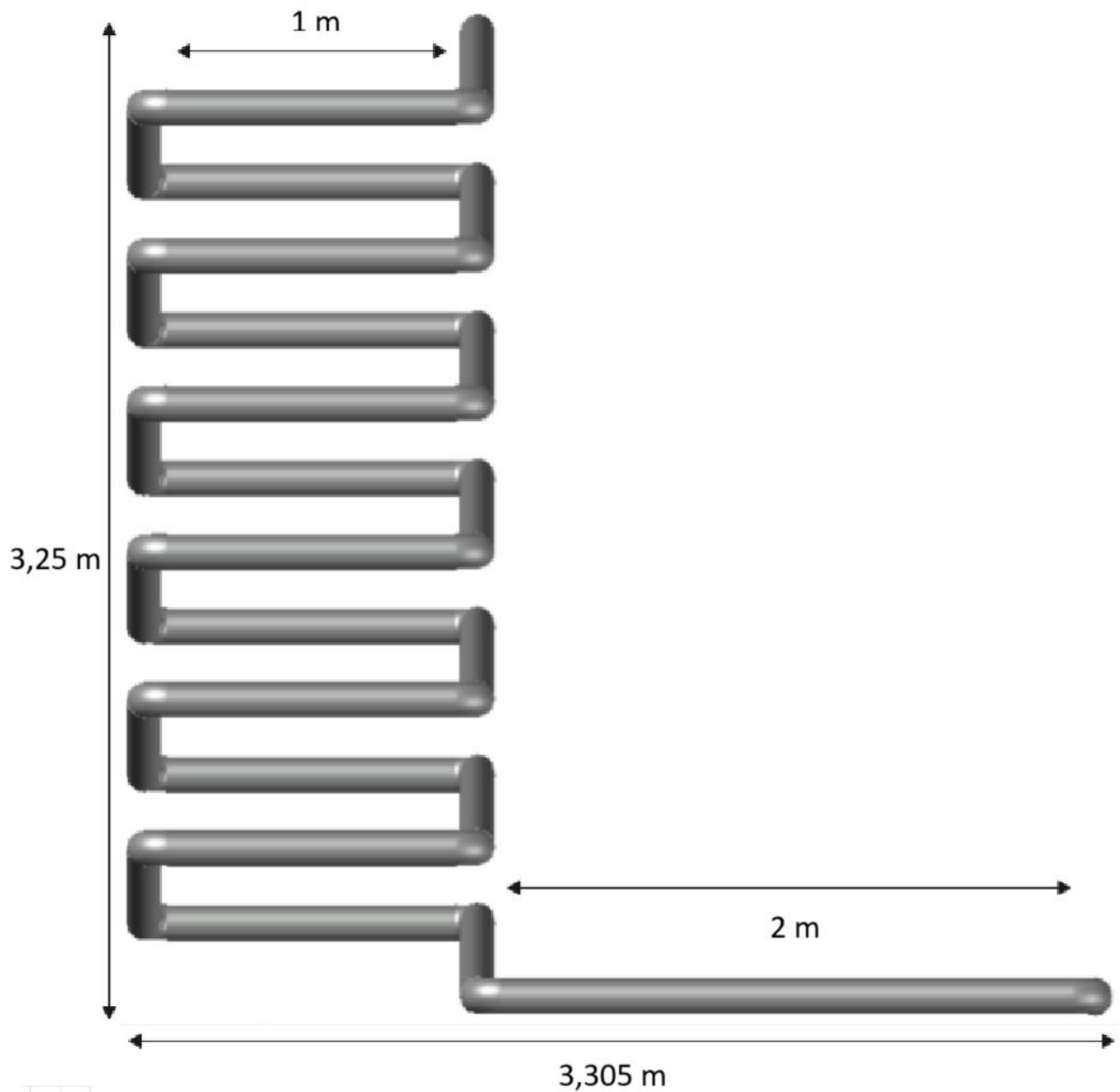
CODOS CON ÁNGULOS DE 90 GRADOS (NO RECTOS)


SEPTIEMBRE 2023		SALVADOR MARÍN DE ALBA		INGENIERÍA QUÍMICA	
FIRMA		<p>DISEÑO DE UN REACTOR PARA LA GASIFICACIÓN EN AGUA SUPERCRÍTICA DE SUBPRODUCTOS DEL RECICLADO DE FIBRAS DE CARBONO DE LA INDUSTRIA AERONÁUTICA</p>			
					
TRABAJO FIN DE GRADO		TÍTULO DEL PLANO:			
FACULTAD DE CIENCIAS		<p><b>VISTA EN PLANTA DE LA DISPOSICIÓN DEL AISLANTE TÉRMICO CON DETALLE</b></p>			
UNIVERSIDAD DE CÁDIZ					
ESCALA	11:1	NÚMERO DE PLANO:			
FORMATO	A4	<b>TFG-05</b>			

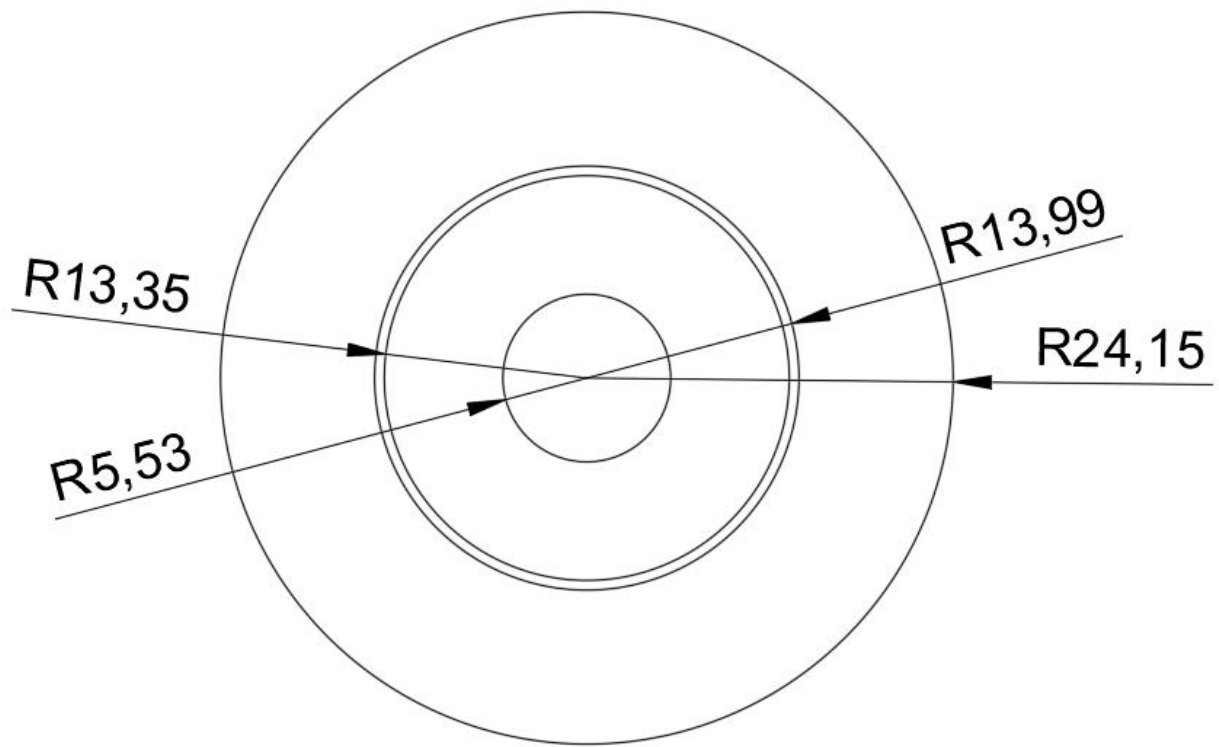


SEPTIEMBRE 2023		SALVADOR MARÍN DE ALBA		INGENIERÍA QUÍMICA	
FIRMA		<p style="text-align: center;">   <b>DISEÑO DE UN REACTOR PARA LA GASIFICACIÓN EN AGUA SUPERCRÍTICA DE SUBPRODUCTOS DEL RECICLADO DE FIBRAS DE CARBONO DE LA INDUSTRIA AERONÁUTICA</b> </p>			
TRABAJO FIN DE GRADO					
FACULTAD DE CIENCIAS		TÍTULO DEL PLANO:			
UNIVERSIDAD DE CÁDIZ		<b>VISTA GENERAL DE LA COMBINACIÓN REACTOR- IC</b>			
ESCALA	N/A	NÚMERO DE PLANO:			
FORMATO	A4	<b>TFG-06</b>			





SEPTIEMBRE 2023		SALVADOR MARÍN DE ALBA		INGENIERÍA QUÍMICA	
FIRMA		<p style="text-align: center;">   <b>DISEÑO DE UN REACTOR PARA LA GASIFICACIÓN EN AGUA SUPERCRÍTICA DE SUBPRODUCTOS DEL RECICLADO DE FIBRAS DE CARBONO DE LA INDUSTRIA AERONÁUTICA</b> </p>			
TRABAJO FIN DE GRADO					
FACULTAD DE CIENCIAS UNIVERSIDAD DE CÁDIZ		<p>TÍTULO DEL PLANO:  <b>VISTA LATERAL DE LA COMBINACIÓN REACTOR- IC</b> </p>			
ESCALA	N/A	<p>NÚMERO DE PLANO:  <b>TFG-07</b> </p>			
FORMATO	A4				



### Conducción externa

Diámetro externo = 48,3 mm

Diámetro interno = 27,98 mm

Espesor de pared = 10,16 mm

### Conducción interna

Diámetro externo = 26,7 mm

Diámetro interno = 11,06 mm

Espesor de pared = 7,82 mm

SEPTIEMBRE 2023		SALVADOR MARÍN DE ALBA		INGENIERÍA QUÍMICA	
FIRMA		 <p>DISEÑO DE UN REACTOR PARA LA GASIFICACIÓN EN AGUA SUPERCRÍTICA DE SUBPRODUCTOS DEL RECICLADO DE FIBRAS DE CARBONO DE LA INDUSTRIA AERONÁUTICA</p>			
TRABAJO FIN DE GRADO					
FACULTAD DE CIENCIAS UNIVERSIDAD DE CÁDIZ		TÍTULO DEL PLANO: <b>DETALLE DE LAS DIMENSIONES DE LAS CONDUCCIONES DEL IC</b>			
ESCALA	5:1	NÚMERO DE PLANO: <b>TFG-08</b>			
FORMATO	A4				

**DOCUMENTO 4:**  
**PLIEGO DE**  
**CONDICIONES**

## **ÍNDICE PLIEGO DE CONDICIONES**

CAPÍTULO 1. DEFINICIÓN Y ALCANCE DEL PLIEGO DE CONDICIONES .....	4
1.1 INTERPRETACIÓN DEL PLIEGO DE CONDICIONES .....	4
1.2 OBJETO DEL PLIEGO .....	4
1.3 DOCUMENTACIÓN QUE DEFINE EL PROYECTO .....	4
CAPÍTULO 2. CONDICIONES GENERALES .....	5
2.1 CONDICIONES GENERALES FACULTATIVAS .....	5
2.1.1 DISPOSICIONES GENERALES .....	5
2.1.2 CONCEPTOS EN EL PLIEGO DE CONDICIONES .....	5
2.1.3 OBLIGACIONES Y DERECHOS DEL CONTRATISTA .....	6
2.1.4 ELABORACIÓN TÉCNICA .....	7
2.1.5 LIBRO DE ÓRDENES .....	8
2.1.6 PLAZO DE COMIENZO DE LA EJECUCIÓN .....	8
2.1.7 CONTROLES DE CALIDAD .....	9
2.1.8 OBRAS DEFECTUOSAS Y PERIODO DE PRUEBA .....	10
2.2 CONDICIONES GENERALES ECONÓMICAS .....	10
2.2.1 BASE FUNDAMENTAL .....	10
2.2.2 FIANZA Y DEVOLUCIÓN DE LA MISMA .....	10
2.2.3 COSTES .....	11
2.2.4 PENALIZACIONES .....	12
2.2.5 SEGUROS .....	13
2.2.6 PAGOS .....	13
2.3 CONDICIONES GENERALES LEGALES .....	14
2.3.1 CONTRATISTA .....	14
2.3.2 CONJUNTO LEGISLATIVO APLICABLE .....	14
2.3.3 RESPONSABILIDADES DEL CONTRATISTA .....	16
2.3.4 ELECCIÓN DE LA EMPRESA EJECUTORA .....	16
2.3.5 LEGISLACIÓN EN ACCIDENTES DE TRABAJO .....	16
2.3.6 SUBCONTRATAS .....	17
2.3.7 DAÑOS A TERCEROS .....	17
2.3.8 RESCISIÓN DEL CONTRATO .....	17
CAPÍTULO 3. CONDICIONES PARTICULARES .....	18
3.1 MEDICIÓN, VALORACIÓN Y ABONO DE TODA LA OBRA .....	18
3.1.1 TUBERÍAS .....	19
3.1.2 AISLANTES .....	19
3.1.3 ALCANCE DE LOS PRECIOS .....	19

3.1.4 VALORACIÓN Y ABONO DE LAS OBRAS .....	19
3.2 CONDICIONES TÉCNICAS DE LOS MATERIALES Y EQUIPOS PRINCIPALES .....	20
3.2.1 REACTOR .....	21
3.2.2 CONDUCCIONES .....	21
3.2.3 INTERCAMBIADOR DE CALOR .....	22
3.2.4 AISLAMIENTO .....	22
3.2.5 BOMBA .....	22

## **CAPÍTULO 1. DEFINICIÓN Y ALCANCE DEL PLIEGO DE CONDICIONES**

### **1.1 INTERPRETACIÓN DEL PLIEGO DE CONDICIONES**

El siguiente pliego de condiciones tiende a unificar criterios y establecer normas definidas en las obras que se realizarán en el presente proyecto. Se fijarán los criterios que se han de aplicar en la ejecución de las obras, las características y ensayos de los materiales a emplear, las normas que se han de seguir en la ejecución de las distintas unidades de obra, las formas de medida y abono de las obras y el plazo de garantía.

### **1.2 OBJETO DEL PLIEGO**

El objetivo del presente pliego de condiciones es exponer los requisitos generales que se exigen para que pueda llevarse a cabo la realización del proyecto “Diseño de un reactor para la gasificación en agua supercrítica de subproductos del reciclado de fibras de carbono de la industria aeronáutica”

Se trata de especificar las condiciones técnicas, facultativas, económicas y legales a tener en cuenta para la correcta realización del proyecto, determinando las obligaciones de las partes intervinientes en el proceso de ejecución.

Este apartado se desarrolla en función de la norma actual en vigencia, evitando la contradicción de leyes, buscando la integración de la normativa aplicable en los aspectos específicos que existan el proyecto.

### **1.3 DOCUMENTACIÓN QUE DEFINE EL PROYECTO**

La documentación presente en el proyecto, que se encarga de describirlo en detalle, es entregada al contratista con finalidad informativa o con relevancia en el contrato. Al presentarse como documento relevante en contrato, la empresa ejecutora está en obligación de cumplir con las especificaciones expuestas, únicamente existiendo modificaciones previamente acordadas por ambas partes.

El presente proyecto se compone de la siguiente documentación:

- Memoria del proyecto
- Anexos
- Planos
- Pliego de Condiciones
- Presupuesto
- Estudio Básico de Seguridad y Salud

De entre los documentos anteriormente mencionados, cabe destacar con carácter contractual cuatro: Memoria, Planos, Pliego de Condiciones y Presupuesto.

- En la Memoria se describirán, con el nivel de detalle necesario para la correcta interpretación, los equipos e instalaciones, incluyendo al final de la misma unos anexos a la memoria en los que se

verán reflejados todos los cálculos necesarios para la realización del proyecto. Tiene como finalidad la de informar al lector del documento.

- En los Planos se definirá la estructura, instalaciones y detalles constructivos de la planta piloto diseñada en el presente proyecto, así como el diseño de los equipos principales de la misma
- En el Pliego de condiciones se definirán las condiciones generales facultativas, económicas y legales, así como las condiciones particulares de los principales equipos y bienes. La información descrita en el mismo debe ser considerada con mayor relevancia respecto a contrariedades o falta de información que pueda existir en toda la documentación adicional que emplea el proyecto.
- En el Presupuesto se definirán, especificando su número y coste, las unidades de obra completas.

## **CAPÍTULO 2. CONDICIONES GENERALES**

Se regula en el presente capítulo el desarrollo general de las obras desde los puntos de vista facultativo (relación entre el Contratista y la Dirección Facultativa), económico y legal.

### **2.1 CONDICIONES GENERALES FACULTATIVAS**

#### **2.1.1 DISPOSICIONES GENERALES**

Se procede a desarrollar las disposiciones generales:

- Real Decreto 1098/2001, de 12 de octubre, por el que se aprueba el Reglamento general de la Ley de Contratos de las Administraciones Públicas.
- Real Decreto Legislativo 2/2015, de 23 de octubre, por el que se aprueba el texto refundido de la Ley del Estatuto de los Trabajadores.
- Orden de 9 de marzo de 1971 por la que se aprueba la Ordenanza General de Seguridad e Higiene en el Trabajo.
- Decreto 3854/1970, de 31 de diciembre, por el que se aprueba el Pliego de Cláusulas Administrativas Generales para la Contratación de Obras del Estado.
- Pliego de Cláusulas económico-administrativas particulares.

En el caso de la existencia de información contradictoria en el presente Pliego de Condiciones con relación a las disposiciones mencionadas anteriormente, debe prevalecer la información del presente documento.

#### **2.1.2 CONCEPTOS EN EL PLIEGO DE CONDICIONES**

**Propiedad:** El pleno derecho del presente TFG corresponde a aquella entidad o empresa que se encargue de la elaboración de la planta diseñada y descrita en el proyecto a escala de planta piloto.

**Contratante:** Entidad encargada de contratar la elaboración del presente proyecto, relegando su completa ejecución al contratista.

**Contratista:** Será aquella organización, entidad, empresa u órgano gubernamental contratado por el contratante para la elaboración del proyecto. Los documentos que conforman el actual proyecto, únicamente podrán ser empleados para el fin de la ejecución del mismo.

**Dirección Facultativa:** Formada por, al menos, un ingeniero superior y un ingeniero técnico. El objetivo de dichos representantes es validar que el proyecto se ejecuta de forma fehaciente al presente Pliego de Condiciones, además de garantizar el correcto funcionamiento de los equipos y ofrecer soporte técnico al contratista.

### **2.1.3 OBLIGACIONES Y DERECHOS DEL CONTRATISTA**

#### *Artículo 1.- Verificación de la calidad de los materiales*

Se consignará la necesidad de someter a control previo todos los materiales a utilizar, sin que este control previo constituya la recepción definitiva de los materiales. Se establecerá el derecho de la Dirección Facultativa a exigir cuantos catálogos, certificados, muestras y ensayos, estime convenientes para asegurarse de la calidad de los materiales. Todos los materiales empleados, aun los no relacionados en este pliego de condiciones, deberán ser de primera calidad. Antes de la instalación, el Contratista presentará al técnico encargado los catálogos, cartas, muestras, certificados de garantía, etc. de los materiales que vaya a emplear en la obra. No se podrán emplear materiales sin que previamente hayan sido aceptados por la Dirección Facultativa.

#### *Artículo 2.- Verificación de los documentos del proyecto*

Antes de dar comienzo a las obras, el Contratista aceptará que con la documentación aportada le resulta suficiente para la comprensión de la totalidad de la obra contratada o, en caso contrario, solicitará, por escrito, las aclaraciones pertinentes.

De la misma forma, si alguna parte de la obra no quedara suficientemente especificada en esta documentación, a juicio del Contratista, no se realizará hasta que la Dirección Facultativa diera las indicaciones necesarias para su correcta ejecución.

#### *Artículo 3.- Información del Contratista a subcontratas*

El Contratista se verá obligado a suministrar toda la información precisa a las diferentes subcontratas, instaladores y oficios, para que su labor se ajuste al proyecto. En cualquier caso, el Contratista será el único responsable de las variaciones o errores que se hubieran podido cometer en obra por desconocimiento de las especificaciones aquí detalladas.



*Artículo 4.- Medidas de seguridad*

El Contratista deberá atenerse a las disposiciones vigentes sobre seguridad e higiene en el trabajo, tanto en lo que se refiere al personal de la obra como a terceros.

Como elemento primordial de seguridad se precisará del establecimiento de la señalización necesaria durante el desarrollo de las obras, haciendo referencia bien a peligros que existan o a las limitaciones de las estructuras.

*Artículo 5.- Presencia del Contratista en la obra*

El Contratista, por sí o por medio de sus facultativos representantes o encargados, debe estar en la obra durante la jornada legal de trabajo y acompañará a la Dirección Facultativa en las visitas que haga a la obra. Además, tendrá el deber de asistir a las asambleas convocadas.

*Artículo 6.- Copias de documentos*

El Contratista tiene derecho a sacar copias, a su costa, de los planos, presupuestos, pliegos de condiciones y demás documentos del proyecto. La Dirección Facultativa, si el Contratista lo solicita, autorizará estas copias con su firma una vez confrontadas con los documentos originales.

*Artículo 7.- Selección del equipo de obra*

El contratista tiene el derecho de seleccionar, enteramente, el equipo de obra, así como el número de operarios siempre y cuando este sea suficiente para cumplir el contrato, estimando una productividad promedio y proporcionando una formación previa a los mismos para facilitar la correcta ejecución de la obra. Asimismo, los operarios que lleven alguna actividad técnicamente especializada deben estar capacitados para ejercer dicha actividad.

*Artículo 8.- Gastos a asumir por el contratista*

El contratista es el responsable único de los desembolsos referidos a la ejecución de la obra y los elementos constructivos auxiliares, el alquiler de los terrenos para el almacenamiento de equipos y materiales, así como el seguro de los mismos y de la obra u otro accidente grave. El desembolso necesario para la correcta eliminación de residuos y posible valorización de los mismos y el equipo indicado en el artículo 4 también corre a cuenta del contratista.

Además, los costes derivados de la instalación y retirada del abastecimiento de agua y electricidad para la correcta ejecución de la obra si fuera necesario y de las correspondientes pruebas necesarias para garantizar los resultados esperados en el funcionamiento de maquinaria durante la ejecución de la obra.

#### **2.1.4 ELABORACIÓN TÉCNICA**

La responsabilidad de la correcta ejecución del proyecto debe asumirse por el ingeniero superior o ingeniero técnico responsable, el cual deberá llevar a cabo tareas de gestión, control y seguridad. Las tareas a ejecutar por esta persona son:

- Asegurar el correcto desarrollo del proyecto, acatando las directrices previamente aprobadas de las distintas fases del mismo.
- Resolver de manera óptima las circunstancias ingenieriles no descritas en el pliego de condiciones.
- Elaborar un informe de incidencias y contratiempos ocurridos durante la ejecución del proyecto, que imposibiliten el desarrollo esperado de la obra en el tiempo especificado en el contrato. Además, deben asignarse las acciones correctivas que se llevarán a cabo para paliar el contratiempo.
- Facilitar a las autoridades competentes y entidades públicas toda la documentación necesaria para cumplir con la legislación vigente durante la ejecución de la obra, así como la justificación de las posibles zonas que se verán afectadas durante el desarrollo del proyecto.
- Bajo accidentes graves o situaciones de urgencia, tomar la responsabilidad inmediata para llevar a cabo medidas correctivas.
- Una vez finalizada la obra, debe quedar registro de las distintas actividades ejecutadas por el contratista, comparándolo con lo especificado en el contrato del proyecto y viendo si se han cumplido satisfactoriamente.
- Tomar parte de la entrega de la materia prima, equipos y material necesario para la ejecución de la obra. Se redactará un documento en el que se registren todas las recepciones, previamente revisando visualmente y de manera técnica si fuese necesario al elemento receptor.

### **2.1.5 LIBRO DE ÓRDENES**

#### *Artículo 9.- Libro de órdenes*

La Dirección Técnica tendrá siempre en la oficina de la obra y a disposición de la Dirección Facultativa un “Libro de órdenes”, con sus hojas foliadas por duplicado y visado por el Colegio Oficial de Ingenieros Químicos. En el mismo se redactarán todas las órdenes que la Dirección Facultativa crea oportuno dar al Contratista para que adopte las medidas de toda índole necesarias para evitar los posibles daños que puedan sufrir los obreros, los viandantes en general, las firmas colindantes o los inquilinos de las mismas, las que crea necesarias para subsanar o corregir las posibles deficiencias constructivas que haya observado en las visitas de la obra y en conjunto, todas las que juzgue indispensables que se lleven a cabo sin contradecir a los documentos del proyecto. Cada orden deberá ser firmada por la Dirección Facultativa y el enterado suscrito por el Contratista o su representante en obra.

### **2.1.6 PLAZO DE COMIENZO DE LA EJECUCIÓN**

*Artículo 10.- Calendario de trabajo*

El Contratista propondrá a la Dirección Facultativa el correspondiente calendario de trabajo. Aceptado este calendario se firmarán por la contrata y por la Dirección Técnica, quedándose cada parte con una copia. La contrata se obliga, mediante dicho documento, a justificar periódicamente el cumplimiento de las ejecuciones programadas en el mismo.

*Artículo 11.- Inicio de las obras*

El ingeniero responsable comenzará cuando se lo comunique el contratista mediante un escrito. El plazo de antelación nunca deberá ser inferior a 24 horas. La ejecución dará lugar, como máximo, en los quince días siguientes a la fecha de adjudicación definitiva a su favor, dando cuenta de oficio a la Dirección Facultativa, quien acusará recibo, del día que se propone inaugurar los trabajos.

Las obras deberán quedar total y absolutamente terminadas en el plazo que se fije en la adjudicación a contar desde igual fecha que en el caso anterior. No se considerará motivo de demora de las obras la posible falta de mano de obra o dificultades en la entrega de los materiales.

### **2.1.7 CONTROLES DE CALIDAD**

*Artículo 12.- Procedencia de los materiales y aparatos*

El Contratista tiene libertad de proveerse de los materiales y aparatos de toda clase en los lugares que le parezcan convenientes, siempre que los mismos reúnan las condiciones exigidas en el contrato, que estén perfectamente preparados para el objeto a que se apliquen, y sean empleados en la obra conforme a lo indicado en el pliego de condiciones y a lo ordenado por la Dirección Facultativa.

No se procederá al empleo y colocación de los materiales y de los aparatos, sin que antes sean examinados y aceptados por la Dirección Facultativa, en los términos que prescriben los pliegos de condiciones. Como se indica en el Artículo 1, los gastos referidos a los ensayos o análisis de los mismos serán a cargo del contratista.

*Artículo 13.- Materiales y aparatos defectuosos*

Cuando los materiales y aparatos no fuesen de la calidad requerida o no estuviesen perfectamente preparados, la Dirección Facultativa dará orden al Contratista para que los reemplace por otros que se ajusten a las condiciones requeridas en los pliegos de condiciones o, a falta de estas, a las órdenes de la Dirección Facultativa.

La Dirección Facultativa podrá, si las circunstancias o el estado de la obra lo aconsejan, permitir el empleo de aquellos materiales defectuosos en mejor estado o imponer el empleo de otros de calidad

superior a la indicada en los pliegos, si no le fuese posible al Contratista suministrarlos de la requerida en los mismos.

### **2.1.8 OBRAS DEFECTUOSAS Y PERIODO DE PRUEBA**

#### *Artículo 14.- Vicios ocultos*

Si la Dirección Facultativa tuviese razones fundadas para sospechar la existencia de vicios ocultos de construcción en las obras ejecutadas, ordenará efectuar, en cualquier tiempo y antes de la recepción definitiva, las demoliciones que crea necesarias para reconocer los trabajos que crea defectuosos.

Los gastos de demolición y reconstrucción que se ocasionen serán de cuenta del Contratista, siempre que los vicios existan realmente y, en caso contrario, correrán a cargo del propietario.

#### *Artículo 15.- Plazo de garantía*

El plazo de garantía será de un año a contar desde la fecha de la recepción. Durante dicho periodo todas las reparaciones derivadas de una mala construcción, siendo el culpable el Contratista, serán abonadas por este. El Artículo 14 podría aplicarse en caso de que la Dirección Facultativa tuviera fundadas razones para creer en la existencia de vicios ocultos en las obras ejecutadas.

## **2.2 CONDICIONES GENERALES ECONÓMICAS**

En el presente apartado del Pliego de Condiciones se tratará el pago de las obras contratadas, el plazo y forma de las entregas, las fianzas y garantías para el cumplimiento del contrato establecido y la obligación del propietario de satisfacer el importe y la remuneración del trabajo contratado.

### **2.2.1 BASE FUNDAMENTAL**

Como base fundamental de estas Condiciones generales económicas, se establece el principio de que el Contratista debe percibir el importe de todos los trabajos ejecutados, siempre que estos se hayan realizado de forma correcta y sujeta al proyecto y Condiciones generales y particulares que fijan la instalación completa.

### **2.2.2 FIANZA Y DEVOLUCIÓN DE LA MISMA**

#### *Artículo 16.- Pago de la fianza*

El contratista debe asumir una fianza, que se usará como anticipo. Esta podrá presentarse como dinero líquido o aval tipo bancario, siendo al menos un cinco por ciento del importe total del precio de contrata.

La fianza depositada será devuelta al Contratista en un plazo que no excederá de treinta días desde la firma del comienzo de la obra.

*Artículo 17.- Ejecución de trabajos con cargo a la fianza*

En el caso de que el Contratista se negase a hacer por su cuenta los trabajos precisos para ultimar la obra bajo lo estipulado en el contrato, la Dirección Facultativa, en nombre y representación del propietario, podrá asignar la contratación de otra entidad, o podrá realizarlos a través de la administración pública, abonando su importe con la fianza depositada.

### **2.2.3 COSTES**

*Artículo 18.- Composición de los costes*

El cálculo de los precios de las distintas unidades de obra es el resultado de sumar los costes directos, los indirectos, los gastos generales y el beneficio industrial.

Se considerarán costes directos:

- a) La mano de obra, con sus pluses y seguros sociales, que intervienen de forma directa en la ejecución de la instalación.
- b) Los materiales que queden integrados en la unidad o que sean necesarios para la ejecución de la misma.
- c) Los gastos de personal, combustible, energía, y resto de costes que tengan lugar por el funcionamiento de las maquinarias e instalaciones utilizadas.
- d) Los gastos de amortización y conservación de la maquinaria, instalaciones, sistemas y equipos.
- e) Los equipos y sistemas de prevención y protección contra accidentes.

Se considerarán costes indirectos los servicios administrativos como oficinas, contabilidad o servicio jurídico, así como el gasto del personal técnico y administrativo adscrito exclusivamente a la obra y los imprevistos.

Se considerarán gastos generales: Los gastos generales de empresa, gastos financieros, cargas fiscales y tasas de la Administración, legalmente establecidas.

Beneficio industrial: El beneficio industrial del Contratista se establece en el seis por ciento sobre la suma de las anteriores partidas, salvo que la contrata ofreciese otro en su oferta inicial.

Se denominará precio de ejecución material al coste de la unidad de obra, es decir, la suma de los anteriores costes a excepción del beneficio industrial.

*Artículo 19.- Trabajos no especificados*

En el caso de que sea necesario realizar tareas no especificadas en el presente documento, se tendrán en cuenta los precios asignados a trabajos o materiales análogos, si los hubiera, y cuando no, se discutirán contradictoriamente entre la Dirección Facultativa y el Contratista, sometiéndose a la aprobación superior si resultase en un acuerdo satisfactorio.

Con relación a cualquier otro trabajo no especificado como parte habitual del mantenimiento de las infraestructuras existentes, pero que el Contratista considere necesario para el adecuado desarrollo de los trabajos, el mismo deberá presentar presupuestos de tres proveedores diferentes. Dichos presupuestos deben contar con la misma medición, descripción de unidad y ejecución y se evaluará cada oferta de forma independiente. La ejecución de dichos trabajos deberá ser aprobada previamente por la Dirección Facultativa.

#### **2.2.4 PENALIZACIONES**

##### *Artículo 20.- Importe de la indemnización por retraso*

El importe de la indemnización que debe abonar el Contratista por causa de retraso no justificado en el plazo de terminación de las obras contratadas será de un interés del cuatro y medio por ciento anual, sobre las sumas totales de las cantidades desembolsadas por el propietario durante el plazo de retraso de la entrega de las obras.

##### *Artículo 21.- Demora de los pagos*

Si el propietario no efectuase el pago de las obras ejecutadas, dentro del mes siguiente al que corresponde el plazo convenido, el Contratista tendrá además el derecho de percibir el abono de un cuatro y medio por ciento anual, en concepto de intereses de demora, durante el espacio de tiempo del retraso y sobre el importe de la mencionada certificación.

Si transcurrieran dos meses a partir del término de dicho plazo de un mes sin realizarse dicho pago, tendrá derecho el Contratista a la rescisión del contrato, procediéndose a la liquidación correspondiente de las obras ejecutadas y de los materiales almacenados, siempre que estos reúnan las condiciones preestablecidas y que su cantidad no exceda de la necesaria para la terminación de la obra contratada o adjudicada.

##### *Artículo 22.- Indemnización de daños causados por fuerza mayor*

El Contratista no contará con derecho alguno a indemnización por causa de pérdidas, averías o perjuicios ocasionados en las obras, a excepción de casos de fuerza mayor. A efectos del presente documento, se consideran como tales casos únicamente desastres naturales o fenómenos naturales superiores a los que sean de prever en el país, siempre que exista constancia inequívoca de que por el

Contratista se tomarán las medidas posibles dentro de sus medios para atenuar los daños. Asimismo, serán considerados como casos de fuerza mayor los destrozos ocasionados violentamente en casos de guerra o robos tumultuosos.

La indemnización se referirá exclusivamente al abono de las unidades de obra ya ejecutadas o materiales almacenados a pie de obra, en ningún caso comprenderá medios auxiliares, maquinaria o instalaciones propiedad del Contratista.

### **2.2.5 SEGUROS**

#### *Artículo 23.- Seguro de obras*

La función del Contratista en este ámbito no es otra que la de velar en todo momento por los intereses de la propiedad, asegurando en la medida de lo posible cualquier material o equipo que pertenezca a la propiedad.

Durante el transcurso de la obra, el Contratista deberá poseer los siguientes seguros:

- Daños ocasionados por catástrofes naturales y demás eventos citados en el Artículo 22, así como los daños que puedan derivarse de la propia actividad de ejecución de la obra.
- Todo vehículo presente en la obra debe estar asegurado, aun cuando el mismo no pertenezca a la propiedad
- Seguro de accidentes y cualquier otro seguro necesario para el desarrollo de la actividad, atendiendo a la legislación vigente.

Los riesgos asegurados y las condiciones que figuren en la póliza o pólizas de seguros, serán responsabilidad del Contratista que, antes de contratarlos, los pondrá en conocimiento del propietario con el objetivo de recabar del mismo su conformidad o reparos.

#### *Artículo 24.- Suplementos*

El Contratista no puede hacer ningún trabajo que ocasione suplementos de gastos sin autorización escrita del propietario de la instalación y con el visto bueno de la Dirección Facultativa. En caso contrario, estos correrán de su cuenta.

### **2.2.6 PAGOS**

#### *Artículo 25.- Pagos*

Como norma general, el pago de las actividades realizadas será mensual, correspondiendo a la totalidad de las actividades realizadas durante el mes anterior.

Cualquier tipo de cantidad monetaria que sea retenida por la propiedad, deberán ser devueltas al contratista cuando finalice el plazo de prueba de la instalación, en el caso de que no se hayan detectado fallos de construcción. En caso de retraso del pago, el Contratista podrá acogerse al Artículo 21.

## **2.3 CONDICIONES GENERALES LEGALES**

### **2.3.1 CONTRATISTA**

#### *Artículo 26.- Contratista*

Pueden ser Contratistas de la obra los españoles y extranjeros que se hallen en posesión de sus derechos civiles con arreglo a las leyes, y las sociedades y compañías legalmente constituidas y reconocidas en España. Quedando únicamente exceptuados aquellos que se hallen procesados criminalmente, estuviesen fallidos, apremiados como deudores o que hubieran faltado reconocidamente a sus compromisos en contratos anteriores.

### **2.3.2 CONJUNTO LEGISLATIVO APLICABLE**

Se emplean las siguientes medidas a nivel legal:

#### *Seguridad y salud en las obras de construcción*

- Orden de 9 de marzo de 1971, Ordenanza general de seguridad e higiene en el trabajo
- Ley 31/1995, de 8 noviembre, de prevención de riesgos laborales.
- Real Decreto 39/1997, de 17 de enero, Reglamento de los servicios de prevención.
- Real Decreto 485/1997, de 14 de abril, sobre las disposiciones mínimas en materia de señalización de seguridad y salud en el trabajo.
- Real Decreto 1627/1997, de 24 de octubre, sobre las disposiciones mínimas de seguridad y salud en las obras de construcción.
- Ley 54/2003, de 13 de diciembre, reforma del marco normativo de la prevención de riesgos laborales.
- Real Decreto 374/2001, de 6 de abril, de protección de la salud y seguridad de los trabajadores contra los riesgos relacionados con los agentes químicos durante el trabajo.

#### *Equipos a presión*

- Real Decreto 2060/2008, de 12 diciembre, de reglamento de equipos a presión y sus instrucciones técnicas complementarias.

#### *Instalaciones eléctricas*



- Real Decreto 223/2008, de 15 de febrero, de reglamento sobre condiciones técnicas y garantías de seguridad en líneas eléctricas de alta tensión y sus instrucciones técnicas complementarias ITC-LAT01.
- Real Decreto 842/2002, de 2 de agosto, de reglamento electrotécnico para baja tensión e instrucciones técnicas complementarias ITC-BT01
- Resolución de 5 de mayo de 2005, Normas particulares y condiciones técnicas y de seguridad de la empresa distribuidora de energía eléctrica “ENDESA” en el ámbito de la Comunidad Autónoma de Andalucía.

#### Medio ambiente y residuos

- Ley 22/2011, de 28 de julio, de residuos y suelos contaminados.
- Ley 37/2003, de 17 de noviembre, Ley del ruido.

#### Abastecimiento de agua y vertido

- Real Decreto 314/2006, de 17 de marzo, de suministro de agua y salubridad.
- Real Decreto 314/2006, de 17 de marzo, de evacuación de agua y salubridad.
- Orden de 28 de julio de 1974, Pliego de prescripciones técnicas generales para tuberías de abastecimiento de agua.

#### Protección contra incendios

- Real Decreto 1942/1993, de 5 de noviembre, de reglamento de instalaciones de protección contra incendios.
- Real Decreto 2267/2004, de 3 de diciembre, de reglamento de seguridad contra incendios en los establecimientos industriales.
- Real Decreto 314/2006, de 17 de marzo, de seguridad en caso de incendio. Detección, Control y Extinción del incendio.

#### Condiciones laborales

- Resolución de 23 de julio de 2022, de la Dirección General de Empleo, por la que se registra y publica el VI Convenio colectivo del sector de la construcción.

Además de toda la normativa ya mencionada, se deberá emplear cualquier otra norma relevante a efectos del proyecto que se encuentre en vigencia.

Esta normativa de obligado cumplimiento podría ser más restrictiva en algunos ámbitos de considerarse oportuno por el jefe de obra.

### **2.3.3 RESPONSABILIDADES DEL CONTRATISTA**

#### *Artículo 27.- Responsabilidad del Contratista*

El Contratista es responsable de la ejecución de las obras en las condiciones establecidas en el contrato y en los documentos que componen el proyecto, sin tener posibilidad alguna de recibir indemnizaciones por haber subestimado variables que hagan que el precio del proyecto sea más elevado del esperado.

La figura del Contratista cuenta con el deber de asegurar la seguridad según la normativa vigente, evitando en la medida de lo posible los potenciales accidentes en los trabajadores y en el personal ajeno que pudieran ocasionarse como fruto de la actividad.

Legalmente, es la persona encargada de responder a nivel judicial en el caso de alegar ante accidentes producidos por negligencias en la obra y de afrontar aquellas infracciones que acarreen multas. El mismo deberá abonar la cantidad acordada bajo el convenio de manera rigurosa.

Asimismo, el Contratista, según lo acordado en la legislación, es el encargado de pagar impuestos o cualquier otro tipo de carga administrativa producida por la actividad. Previo comienzo y abono de tasas, el Contratista se encuentra en pleno derecho de conocer las tasas derivadas que puedan surgir a medida que avanza la obra.

### **2.3.4 ELECCIÓN DE LA EMPRESA EJECUTORA**

La adjudicación de la entidad que lleve a cabo el proyecto tendrá lugar mediante una subasta cerrada. En la misma, las empresas que pretendan ejecutar el proyecto deberán proporcionar la siguiente información:

- Documentos que avalen la capacidad técnica para poder desarrollar la actividad.
- Situación empresarial en términos financieros.
- Duración estimada para la consecución del proyecto al completo.
- Coste total de la ejecución del proyecto.

### **2.3.5 LEGISLACIÓN EN ACCIDENTES DE TRABAJO**

Como viene reflejado en el Artículo 27, la labor del Contratista reside, entre otras cosas, en minimizar los riesgos laborales y de enseres a partir de la normativa obligatoria vigente, llegando si fuera necesario a usarse medidas más restrictivas que la propia legislación.

Todos los trabajadores deberán encontrarse dados de alta en la seguridad social, con registro de las horas trabajadas y con la formación suficiente en materia de prevención de riesgos laborales para que la ejecución del proyecto pueda realizarse sin accidentes laborales o con los mínimos posibles.

### **2.3.6 SUBCONTRATAS**

#### *Artículo 28.- Subcontratas*

Para un proyecto como el del presente documento, el contratista no podrá efectuar la subcontratación de terceros para ejecutar el proyecto, salvo que esté expresamente indicado en el contrato del proyecto.

El Contratista será el único responsable de la totalidad de la obra tanto desde el punto de vista legal como económico, reconociéndose como el único interlocutor válido para la Dirección Facultativa.

### **2.3.7 DAÑOS A TERCEROS**

#### *Artículo 29.- Daños a terceros*

El Contratista será responsable de todos los accidentes que por inexperiencia o descuido sobrevinieran tanto en la edificación donde se efectúen las obras, como en las contiguas. Será, por tanto, de su cuenta el abono de las indemnizaciones a quien corresponda y cuando a ello hubiere lugar, de todos los daños y perjuicios que puedan causarse en las operaciones de ejecución de las obras.

En el momento que surja algún daño que afecte a entidades externas ajenas a la obra, se tendrá que establecer una corrección por parte del contratista para remediarlo. Deberá de establecerse una medida correctora para evitar que vuelva a ocurrir la misma incidencia en el futuro. Además, en caso de que sea necesario el abono de una indemnización, esta correrá a cuenta del Contratista.

### **2.3.8 RESCISIÓN DEL CONTRATO**

#### *Artículo 30.- Causas de rescisión del contrato*

Se considerarán causas suficientes de rescisión del contrato las que a continuación se señalan:

1. La muerte, jubilación o incapacitación del Contratista.
2. La quiebra del Contratista.
3. Las alteraciones del contrato que conlleven una variación del presupuesto de más de un veinticinco por ciento.

4. Las alteraciones del contrato que conlleven una variación de las unidades de obra superior al cuarenta por ciento.
5. La suspensión de la obra comenzada por causas ajenas a la contrata dentro del plazo de tres meses a partir de la adjudicación, lo que conllevará la devolución automática de la fianza.
6. La suspensión de la obra comenzada, siempre que el plazo de suspensión haya excedido de un año.
7. El hecho de que la contrata no de comienzo a los trabajos dentro del plazo señalado para los mismos.
8. El incumplimiento de las condiciones del contrato cuando implique un perjuicio en los intereses de las obras.
9. La mala fe en la ejecución de la obra.
10. La terminación de la obra sin causas justificadas.

En el caso de que se cumpla alguna de las situaciones arriba enumeradas quedará rescindido el contrato perdiendo el Contratista la fianza y quedando sin derecho a reclamación alguna.

### **CAPÍTULO 3. CONDICIONES PARTICULARES**

En este capítulo se detallan las características técnicas que han de cumplir los materiales, maquinaria y equipos a emplear, así como los medios de ejecución de las obras. Además, se redactarán las normas de seguridad en el desarrollo de los trabajos y los métodos de medición y valoración a seguir para cada uno de los capítulos que conforman la ejecución al completo del proyecto.

#### **3.1 MEDICIÓN, VALORACIÓN Y ABONO DE TODA LA OBRA**

En el presente apartado se indica el criterio adoptado para la realización de las mediciones de las distintas unidades de obra necesarias, así como la valoración de las mismas.

El constructor deberá aportar el estudio de sus precios unitarios referidos a los criterios de medición aquí expuestos, entendiéndose que las cantidades ofertadas hacen referencia a la totalidad de las mismas.

En caso de indefinición de alguna unidad de obra, el Constructor deberá acompañar la oferta con las aclaraciones precisas que permitan valorar el alcance de la cobertura del precio asignado, entendiéndose en otro caso que la cantidad ofertada hace referencia a la unidad de obra correspondiente en su totalidad, y de acuerdo con las especificaciones marcadas.

Si por omisión apareciese alguna unidad de obra cuya forma de medición y abono no hubiese quedado especificada, o en los casos de aparición de precios contradictorios, deberá recurrirse al Pliego de

Condiciones de Carácter General, debiéndose aceptar en todo caso por el Constructor, en forma inapelable, la propuesta redactada a tal efecto por el Director de Obra.

### **3.1.1 TUBERÍAS**

La medición y abono de las mismas se hará por metro lineal realmente ejecutado sobre la unidad de obra totalmente terminada, sin incremento alguno por empalmes, piezas especiales o cualquier otro elemento necesario cuyo precio quedará incluido en el metro lineal especificado.

El precio comprende los materiales, mano de obra, medios auxiliares y cualquier otro gasto requerido para dejar completamente terminada la unidad.

### **3.1.2 AISLANTES**

Se medirán y abonarán en m<sup>2</sup> de superficie revestida. El precio incluye todos los materiales, mano de obra, medios auxiliares y cualquier otro gasto requerido para dejar completamente terminada la unidad.

En ningún caso se abonarán los solapes, que deberán contabilizarse dentro del precio asignado.

### **3.1.3 ALCANCE DE LOS PRECIOS**

El precio de cada unidad de obra suministrada por el contratista que afecta a la obra civil y/o instalación, maquinaria o equipo de cualquier índole, abarca:

- Gastos de extracción, aprovisionamiento, transporte, montaje, pruebas en vacío y carga, muestras, ensayos, control de calidad, acabado de materiales, equipos y obras necesarios, así como las ayudas de albañilería, electricidad, fontanería que se precisen.
- Todos los gastos que dé lugar el personal que directa o indirectamente intervengan en su ejecución y todos los gastos relativos a medios auxiliares, ayudas, seguros, gastos generales, gravámenes fiscales o de otra clase, indemnizaciones o abonos por cualquier concepto; entendiéndose que la unidad de obra quedará total y perfectamente terminada y con la calidad que se exige en el proyecto y que, en todo caso, tiene el carácter de mínima.

No se podrá reclamar, adicionalmente a una unidad de obra, otras en concepto de elementos o trabajos previos y/o complementarios, a menos que tales figuren medidas en el presupuesto proporcionado por el contratista.

### **3.1.4 VALORACIÓN Y ABONO DE LAS OBRAS**

La Dirección Técnica de la Obra cuenta con la responsabilidad de formar mensualmente las relaciones valoradas de los trabajos ejecutados. Estas relaciones valoradas, por lo que a Propiedad y Dirección

Facultativa se refiere, contarán con carácter únicamente provisional, no entrañando aceptación definitiva ni aprobación absoluta.

El pago de las obras se verificará por la Propiedad contra la certificación aprobada, expedida por la Dirección Facultativa de ellas. En ningún caso salvo el de rescisión, cuando así convenga a la Propiedad, se tendrán en cuenta, a efectos de liquidación, los materiales acopiados a pie de obra ni otros elementos auxiliares que en ella estén interviniendo.

Serán de cuenta del Constructor cuantos gastos de todo orden se originen a la Administración, a la Dirección Técnica o a sus Delegados para la toma de datos y redacción de las mediciones u operaciones necesarias para abonar total o parcialmente las obras.

Una vez terminadas las obras se procederá a hacer liquidación general, la cual constará de las mediciones y valoraciones de todas las unidades que constituyen la totalidad de la obra.

### **3.2 CONDICIONES TÉCNICAS DE LOS MATERIALES Y EQUIPOS PRINCIPALES**

Los materiales deberán cumplir las condiciones que sobre ellos se especifiquen en los distintos documentos que componen el Proyecto. Tendrán preferencia, en cuanto a su aceptabilidad, aquellos materiales que estén en posesión de Documento de Idoneidad Técnica, que avalen sus cualidades, emitido por Organismos Técnicos reconocidos.

Por parte del Contratista debe existir obligación de comunicar a los suministradores las cualidades que se exigen para los distintos materiales, aconsejándose que, previamente al empleo de los mismos, sea solicitado un informe sobre ellos a la Dirección Facultativa y al Organismo encargado del Control de Calidad.

El Contratista será responsable del empleo de materiales que cumplan con las condiciones exigidas. Siendo estas condiciones independientes, con respecto al nivel de control de calidad para aceptación de los mismos que se establece en el apartado de Especificaciones de Control de Calidad. Aquellos materiales que no cumplan con las condiciones exigidas deberán ser sustituidos, sea cual fuese la fase en que se encontrase la ejecución de la obra, corriendo el Contratista con todos los gastos que ello ocasionase.

### **3.2.1 REACTOR**

Deberá cumplir las especificaciones del reactor detalladas en el Documento 2. Anexos y seguir la norma ANSI B36.1. Tolerancia máxima de fabricación: 12'5%. Material: INCONEL 625 según norma ANSI B31.1.

Los ensayos, controles e inspecciones especificados por dichas normas serán realizados por el proveedor, entregándose a la dirección una copia de los resultados de estos.

El reactor estará constituido por una tubería de Inconel 625 de dos pulgadas de diámetro nominal y un espesor de 11,07 milímetros.

### **3.2.2 CONDUCCIONES**

La superficie interior de cualquier elemento será lisa, no pudiendo admitirse otros defectos de irregularidad que los de carácter accidental o local que queden dentro de las tolerancias prescritas, y que no representen merme de la calidad ni de la capacidad.

Todos los elementos de la conducción deberán resistir, sin daños, a todos los esfuerzos que estén llamados a soportar en servicio y durante las pruebas, y ser absolutamente estancos, no produciendo alteraciones en las condiciones físicas y químicas de las aguas conducidas.

Todos los elementos de la tubería llevarán, como mínimo, realizadas por cualquier procedimiento que asegure su duración permanente, las distintas marcas siguientes:

- Marca de fábrica.
- Diámetro interior en mm.
- Presión normalizada en kg/cm<sup>2</sup>.
- Marca de identificación de serie que permita encontrar la fecha de fabricación.

Las tuberías, al igual que el reactor, que se empleen a lo largo de toda la planta, deberán seguir la norma ANSI B36.1. Tolerancia máxima de fabricación del 12'5% y fabricadas en INCONEL 625.

Los ensayos, controles e inspecciones especificados en la normativa vigente serán realizados por el fabricante, entregándose a la dirección una copia de las muestras de dichas pruebas y los resultados pertinentes.

### **3.2.3 INTERCAMBIADOR DE CALOR**

El intercambiador de calor será de tubos concéntricos y deberá cumplir con los requisitos arriba impuestos tanto para el reactor como para las conducciones de la instalación.

Deberá seguir la norma ANSI B36, con una tolerancia máxima de fabricación del 12'5% y estar construido en INCONEL 625 según la norma ANSI B31.1. Los ensayos, controles e inspecciones especificados por dichas normas serán realizados por el proveedor, entregándose a la dirección una copia de los resultados de estos.

El tubo interior será de Inconel 625 de 3/4 de pulgada de diámetro nominal y un espesor de 7,82 milímetros y el tubo exterior de 1 1/2 pulgadas de diámetro nominal y un espesor de 10,16 milímetros.

### **3.2.4 AISLAMIENTO**

Las siguientes capas y prestaciones hacen referencia tanto al aislante térmico del reactor como el del intercambiador de calor.

Recubrimiento protector 1: El recubrimiento protector interior a aplicar será mediante coquillas de Lana mineral. Dicho aislante deberá cumplir con los requisitos de la norma UNE- EN 14303:2017.

Recubrimiento protector 2: El recubrimiento protector exterior a aplicar será mediante mantas de Lana mineral. Dicho aislante deberá cumplir con los requisitos de la norma UNE- EN 13496:2014.

La malla de alambre será de acero galvanizado de 25 m x 1 m. El alambre para enrollar será de no menos de 1 mm de espesor en acero suave galvanizado. Los flejes en acero galvanizado serán de 20 mm x 0,5 mm.

### **3.2.5 BOMBA**

Debe cumplir todos los requisitos técnicos recogidos en los documentos “Memoria” y “Anexos”, los cuales han sido suministrados por el fabricante bajo su propia responsabilidad.



# **DOCUMENTO 5: PRESUPUESTO**

## **ÍNDICE PRESUPUESTO**

1. OBJETO .....	3
2. CÁLCULO DE COSTES .....	3
2.1 BOMBA DE ALTA PRESIÓN .....	4
2.2 TUBERÍAS DEL REACTOR .....	5
2.3 INTERCAMBIADOR DE CALOR .....	5
2.4 COQUILLAS DE LANA MINERAL .....	6
2.5 MANTA DE LANA DE ROCA .....	7
2.6 LÁMINA DE ALUMINIO .....	8
2.7 DEPÓSITOS DE ALIMENTACIÓN .....	8
2.8 CALENTADOR .....	9
3. PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN MATERIAL .....	10

## **1. OBJETO**

En el presente proyecto se llevará a cabo un breve estudio económico con el objetivo de conocer de manera aproximada el coste desglosado de los equipos necesarios, a partir de la información proporcionada por los proveedores.

La finalidad de establecer un presupuesto del proyecto a diseñar radica, fundamentalmente, en los siguientes aspectos:

- Determinar de forma semicuantitativa aquellos bienes que suponen un mayor impacto económico.
- Deducir el coste material y la mano de obra necesarios para realizar el proyecto y escalar a partir de dicho coste el Presupuesto de Ejecución General (PEG).
- Estimar la rentabilidad del proyecto, decidiendo si es rentable, o no, su ejecución.

Cabe mencionar que se trata de una planta a escala piloto por lo que aun sin ser rentable económicamente puede estar justificada la elaboración del proyecto por los beneficios en cuanto a información potencial y determinación de la posibilidad real de escalamiento, proporcionados por el proyecto.

El Presupuesto de Ejecución Material (PEM) hace referencia al coste material y mano de obra mencionadas en el segundo punto y es el primer paso para la obtención de un presupuesto completo. Este presupuesto no es más que una estimación de los costes que supondrían el diseño de cada equipo o bien, para aquellos que han sido seleccionados por catálogo, su precio de venta al público.

Una vez se haya calculado el PEM se puede obtener, en base a este último, el Presupuesto de Ejecución por Contrata (PEC), el cual resulta ser la suma de una parte proporcional a los gastos generales del contratista, el beneficio industrial y los gastos en concepto de contingencias. Con todo esto, el valor del Presupuesto de Ejecución General (PEG) se obtiene mediante la siguiente fórmula:

$$\text{PEG} = \text{PEM} + \text{GG} + \text{BI} + \text{IMP} = \text{PEC} + \text{IMP} \quad (1)$$

En el presente TFG, solo se tendrá en cuenta el impuesto sobre el valor añadido (IVA), manteniendo al margen todo tipo de impuestos, seguros, dirección de obra o cualquier otro tipo de gasto que no se haya indicado con anterioridad. Quedan fuera de las competencias del presente TFG los estudios de amortización y cualquier otro gasto o proyecto que no se detalle en el presente presupuesto.

## **2. CÁLCULO DE COSTES**

En el siguiente apartado se deducirán los costes de manera aproximada para los distintos equipos estudiados en el presente TFG. Cabe mencionar que existen más equipos y accesorios necesarios para

el correcto funcionamiento y mantenimiento de la planta, pero se estudiarán fundamentalmente aquellos equipos que se han abarcado en profundidad, es decir, los equipos principales.

Muchos de los precios han tenido que ser recalculados debido a que muchos pertenecían a presupuestos hechos en años anteriores, para poder contar con un precio más actual, algunos de ellos se han corregido usando los índices Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI).

Para hacer dichos cálculos se sigue la siguiente ecuación y se atenderá a la Tabla P1:

$$\text{Precio equipo} = \text{Coste (precio año conocido)} \cdot \frac{\text{CEPCI (actual)}}{\text{CEPCI (precio año conocido)}}$$

*Tabla P1: Evolución en el tiempo del CEPCI*

AÑO	CEPCI	AÑO	CEPCI	AÑO	CEPCI	AÑO	CEPCI
1950	73,9	1972	132,3	1989	355,4	2006	499,6
1953	84,7	1973	144,1	1990	357,6	2007	525,4
1955	88,3	1974	164,4	1991	361,3	2008	575,4
1958	99,7	1975	182,4	1992	358,2	2009	521,9
1959	101,8	1976	192,1	1993	359,2	2010	550,8
1960	102	1977	204,1	1994	368,1	2011	585,7
1961	101,5	1978	218,8	1995	381,1	2012	584,6
1962	102	1979	238,7	1996	381,7	2013	567,6
1963	102,4	1980	261,2	1997	386,5	2014	576,1
1964	102,3	1981	297	1998	389,5	2016	541,7
1965	104,2	1982	314	1999	390,6	2017	567,5
1966	107,2	1983	316,9	2000	394,1	2018	603,1
1967	109,7	1984	322,7	2001	394,3	2019	607,5
1968	113,6	1985	325,3	2002	395,6	2020	596,2
1969	119	1986	318,4	2003	402	2021	708,8
1970	125,7	1987	323,8	2004	444,2	2022	816,0
1971	132,3	1988	342,5	2005	468,2	2023	797,6

## 2.1 BOMBA DE ALTA PRESIÓN

La bomba seleccionada para la planta diseñada procede del catálogo de bombas de alta presión de la empresa “HAWK International”. En concreto, se trata de la bomba XLT1530I por ser la que menor potencia consume de la serie de bombas que cumplen con los requisitos necesarios. El precio de la misma se obtuvo por medio de un comercial de la propia empresa:

*Tabla P2: Coste de la bomba de alta presión, HAWK International*

COSTE DE LA BOMBA SELECCIONADA	
CARACTERÍSTICAS	BOMBA XLT1520I
P.V.P SIN IVA (€)	3222
P.V.P CON IVA (€)	3898,62

Este precio fue ofertado por un comerciante a 31 de julio de 2023, por lo que no es necesario escalar el precio en el tiempo.

## 2.2 TUBERÍAS DEL REACTOR

No se ha podido contactar con ninguna empresa que ofreciera un presupuesto para la construcción del reactor, por lo que se tomará como referencia los precios que han sido suministrados de 3/4" XXS por la empresa "CONECBAND" en el 2018. El precio base de la tubería con los debidos costes de corte, certificados, embalaje y transporte es de 261 € para una longitud de 6 metros. Sin embargo, la tubería seleccionada en el presente TFG para el reactor es de 2" XXS, por lo que es de un tamaño bastante mayor. Se estimará el precio de la misma a partir del cociente entre las masas de una tubería de un metro de ambos tamaños.

$$\text{Cociente (2"/0,75")} = \frac{\frac{4}{\pi} \cdot (D_{\text{ext}2''}^2 - D_{\text{int}2''}^2)}{\frac{4}{\pi} \cdot (D_{\text{ext}0,75''}^2 - D_{\text{int}0,75''}^2)} = \frac{0,06032^2 - 0,03818^2}{0,0267^2 - 0,01106^2} = 3,693$$

Por tanto, el coste de un metro de una tubería de Inconel 625 de 2" XXS en 2018 sería el siguiente:

$$\text{Precio 2" XXS/m} = 3,693 \text{ €} \cdot \frac{261}{6} = 160,65 \text{ €}$$

Este precio se escalará en el tiempo mediante el CEPCI:

$$\text{Precio 2" XXS/m} = 160,65 \text{ €} \cdot \frac{797,6}{603,1} = 212,45 \text{ €}$$

En consecuencia, para 400 metros de reactor:

$$\text{Precio Reactor} = 212,45 \text{ €} \cdot 400 \text{ m} = 84980 \text{ €}$$

## 2.3 INTERCAMBIADOR DE CALOR

Para estimar el precio del intercambiador de calor del presente proyecto se atenderá al estimador de costes de la editorial "McGraw Hill" basado en el libro "Plant Design and Economics for Chemical Engineers". En él se pueden seleccionar distintos equipos con varias características para obtener el costo del mismo para el año 2002. Seleccionando un intercambiador de doble tubo de acero inoxidable se ofrecen distintas posibilidades en cuanto a la presión de operación y ninguna coincide con 250 bar, por lo que se interpolará el resultado a partir de los valores conocidos. En la Tabla P3 se presentan las distintas posibilidades en cuanto a presión ofrecidas por el estimador de costes:

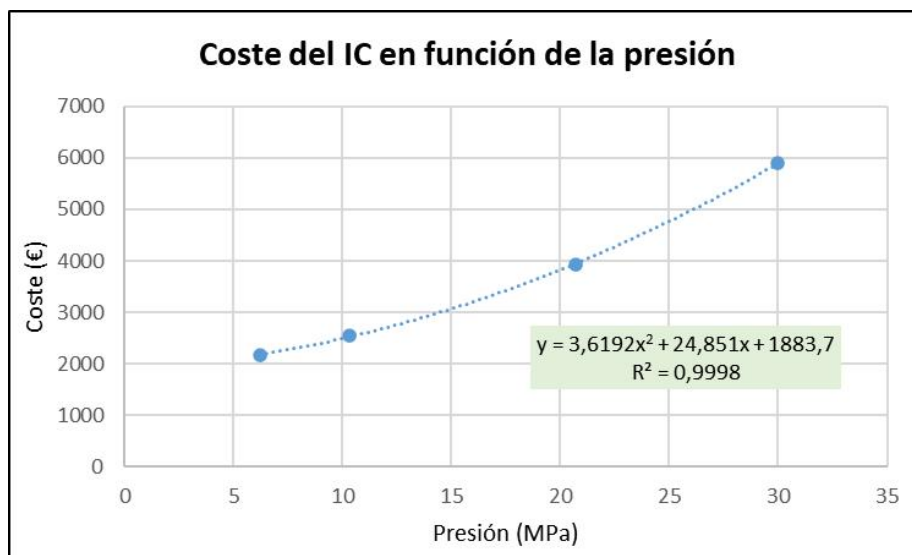
*Tabla P3: Estimación de costes del IC para distintas presiones, McGraw Hill cost estimator*

*Diseño de un reactor para la gasificación en agua supercrítica de subproductos del reciclado de fibras de carbono de la industria aeronáutica*

Equipment Number	Type of Equipment	Equipment Specifications	Equipment Cost in \$, Jan 2002 CE index = 390.4	Comments
1	Double-pipe heat exchanger Stainless steel	1.03 surface area, m <sup>2</sup>	2160	6,205 kPa
2	Double-pipe heat exchanger Stainless steel	1.03 surface area, m <sup>2</sup>	2553	10,304 kPa
3	Double-pipe heat exchanger Stainless steel	1.03 surface area, m <sup>2</sup>	3928	20,680 kPa
4	Double-pipe heat exchanger Stainless steel	1.03 surface area, m <sup>2</sup>	5892	30,000 kPa

Cabe mencionar que el propio estimador de costes ofrecía un valor del CEPCI para el año estudiado, no es exactamente el valor de la anterior Tabla P1, pero se hará el cálculo con el valor ofrecido por el estimador de costes.

A continuación, se muestra en la Figura P1 a la función matemática que relaciona la presión de operación del intercambiador de calor con el coste del mismo:



*Figura P1: Coste del IC en función de la presión de operación*

Por tanto, para una presión de 25 MPa, el costo del intercambiador de calor en 2002 sería:

$$\text{Precio IC (2002)} = 3,6192 \cdot 25^2 + 24,851 \cdot 25 + 1883,7 = 4767 \text{ €}$$

Escalando dicho precio para la actualidad a partir del CEPCI:

$$\text{Precio IC (2023)} = 4767 \text{ €} \cdot \frac{797,6}{390,4} = 9739,1 \text{ €}$$

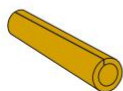
## 2.4 COQUILLAS DE LANA MINERAL

La primera capa del aislante térmico tanto del reactor como del intercambiador de calor es una coquilla de lana mineral de 60 mm de espesor. En concreto, se seleccionó del catálogo de la empresa “ISOVER” el aislamiento TECH Pipe Section MT 4.1, de 2” para el caso del reactor y 1 1/2” para el

IC. A continuación, se muestra la Tabla P4, que se trata de una sección de la tabla de precios correspondiente a dicho aislante, obtenida directamente del catálogo de la propia empresa:

*Tabla P4: Lista de precios de las distintas opciones de coquillas de lana mineral, Catálogo “ISOVER”*

Producto	Diámetro		Espesores (mm)									
	Tubería (")	Interior Coquillas (mm)	30		40		50		60		80	
			€/ml	ml/Bolsa	€/ml	ml/Bolsa	€/ml	ml/Bolsa	€/ml	ml/Bolsa	€/ml	ml/Bolsa
<b> AISLAMIENTO TÉRMICO Y CALORIFUGADO PARA TUBERÍAS </b>												
<b>TECH Pipe Section MT 4.1</b> Elementos moldeados de Lana de Roca con forma cilíndrica y estructura concéntrica. Llevan practicada una abertura en su generatriz para permitir su colocación sobre la tubería. Aislamiento térmico y calorifugado para tuberías e instalaciones industriales. Coquillas de gran longitud que facilitan una rápida y eficiente instalación.	1/2	21	6,75	42,00	8,85	27,60						
			<b>KD70937</b>		<b>KD70938</b>							
	3/4	27	7,05	38,40	9,25	25,20	11,60	18,00				
			<b>KD70939</b>		<b>KD70940</b>		<b>KD70941</b>					
	1	34	7,55	30,00	10,30	21,60	12,95	15,60	17,20	12,00		
			<b>KD70942</b>		<b>KD70943</b>		<b>KD70944</b>		<b>KD70945</b>			
	1 1/4	42	8,35	26,40	11,35	19,20						
			<b>KD70946</b>		<b>KD70947</b>							
	1 1/2	48	9,25	22,80	12,10	16,80	15,60	12,00	19,80	9,60		
		<b>KD70948</b>		<b>KD70949</b>		<b>KD70950</b>		<b>KD68927</b>				
2	60	13,70	20,40	17,80	14,40	22,55	10,80	25,95	8,40	38,80	4,80	
		<b>KD70951</b>		<b>KD70952</b>		<b>KD68930</b>		<b>KD68929</b>		<b>KD68931</b>		
2 1/2	76	14,90	14,40	19,80	10,80	25,65	8,40	29,15	6,00	41,70	4,80	
		<b>KD70953</b>		<b>KD68936</b>		<b>KD68940</b>		<b>KD68939</b>		<b>KD68938</b>		



Una vez conocido el precio del metro de aislante para coquillas de 2” y 1 1/2” se calculará el coste correspondiente a 400 metros de reactor y 30 metros de IC:

$$\text{Precio coquillas (Reactor)} = 25,95 \text{ €} \cdot 400 \text{ m} = 10380 \text{ €}$$

$$\text{Precio coquillas (IC)} = 19,80 \text{ €} \cdot 30 \text{ m} = 594 \text{ €}$$

## 2.5 MANTA DE LANA DE ROCA

Tanto para el reactor como para el intercambiador de calor diseñado en el presente TFG, se decidió utilizar dos vueltas de una manta de lana mineral (lana de roca) presente en el catálogo de la empresa “ISOVER” y, en concreto, la comercializada como TECH Wired Mat MT 4.2, con un espesor de 70 mm por vuelta. A continuación, se muestra la Tabla P5, que se trata de una sección de la tabla de precios correspondiente a dicho aislante, obtenida directamente del catálogo de la propia empresa:

*Tabla P5: Lista de precios de las distintas opciones de mantas de lana mineral, Catálogo “ISOVER”*

Producto	Dimensiones (m)		Espesor (mm)	Precio (€/m²)	m²/Bulto	m²/Palé	m²/Camión
	Largo	Ancho					
<b>TECH Wired Mat MT 4.2</b> Manta armada de Lana de Roca. Incorpora una malla metálica de acero galvanizado por una cara, cosida con hilo de acero. Aislamiento térmico para temperaturas Medias. MST: 600°C $\lambda_{50^\circ\text{C}} 0,041 \text{ W/mK}$ ; $\lambda_{200^\circ\text{C}} 0,065 \text{ W/mK}$	6,00	1,00	40	15,20	6,00	90,00	2.340
	5,00	1,00	50	18,80	5,00	75,00	1.950
	5,00	1,00	60	21,10	5,00	75,00	1.950
	4,50	1,00	70	24,25	4,50	67,50	1.755
	3,00	1,00	80	27,20	3,00	45,00	1.170
	3,00	1,00	100	31,80	3,00	45,00	1.170
	2,50	1,00	120	35,00	2,50	37,50	975

El cálculo del área de manta aislante necesaria para el reactor y el IC se muestra a continuación:

$$\text{Área aislante (Reactor)} = \pi \cdot L \cdot (D_{\text{extCoquilla}} + D_{\text{ext1 vuelta de manta}}) = \pi \cdot 400 \cdot (0,1803 \cdot + 0,2503) = 541,11 \text{ m}^2$$

$$\text{Área aislante (IC)} = \pi \cdot L \cdot (D_{\text{extCoquilla}} + D_{\text{ext1 vuelta de manta}}) = \pi \cdot 30 \cdot (0,1683 + 0,2383) = 38,32 \text{ m}^2$$

Por tanto, el coste de la manta aislante TECH Wired Mat MT 4.2 es el siguiente:

$$\text{Coste manta LM (Reactor)} = 541,11 \text{ m}^2 \cdot 24,25 \text{ €} = 13121,9 \text{ €}$$

$$\text{Coste manta LM (IC)} = 38,32 \text{ m}^2 \cdot 24,25 \text{ €} = 929,3 \text{ €}$$

## 2.6 LÁMINA DE ALUMINIO

Se decidió colocar una fina capa de aluminio sobre el aislante para evitar, en la medida de lo posible, el deterioro del mismo. Además, dicha lámina será de aluminio brillante (reflexivo) con el fin de disminuir todo lo posible las pérdidas energéticas por radiación.

### AISLAMIENTO REFLEXIVO RF1 3500X120 CM 4 MM ESPESOR



**118,00 € IVA incluido**

**97,52 € sin IVA**

2,81 € /Metro cuadrado IVA incluido

Tiene 4 mm con cámara de aire de 2 cm de espesor. Rollo de 42 m<sup>2</sup>.

*Figura P2: Precio de la lámina de aluminio que recubre al reactor, Catálogo "OBRAMAT"*

El cálculo del área de la lámina de aluminio necesaria se presenta a continuación:

$$\text{Área aluminio (Reactor)} = \pi \cdot L \cdot D_{\text{ext,manta de LM}} = \pi \cdot 400 \cdot 0,3203 = 402,50 \text{ m}^2$$

$$\text{Área aluminio (IC)} = \pi \cdot L \cdot D_{\text{ext,manta de LM}} = \pi \cdot 30 \cdot 0,3083 = 29,06 \text{ m}^2$$

Por tanto, el coste de la lámina de aluminio es el siguiente:

$$\text{Coste aluminio (Reactor)} = 402,5 \text{ m}^2 \cdot 2,81 \text{ €} = 1131 \text{ €}$$

$$\text{Coste aluminio (IC)} = 29,06 \text{ m}^2 \cdot 2,81 \text{ €} = 81,7 \text{ €}$$

## 2.7 DEPÓSITOS DE ALIMENTACIÓN

Se determinó el uso de dos depósitos de alimentación de un volumen de 5000 litros cada uno, presentes en el catálogo de la empresa "Hidroserver", con el objetivo de que si un tanque o la línea de abastecimiento a la bomba proveniente de uno de los tanques se ve afectada por un problema, la planta puede seguir funcionando correctamente:





Capacidad (L)	Diámetro (m)	Altura (m)	Precio (€)
5000	1,50	3,28	1.137
6000	1,50	3,84	1.170
8000	2,00	3,16	1.329
10000	2,00	3,80	1.550
12000	2,45	3,30	1.584
20000	2,45	4,99	2.363

*Figura P3: Depósito vertical con patas, Catálogo “Hidroserver”*

De esta forma, dos tanques de 5000 litros presentan un coste de 2274 €.

## 2.8 CALENTADOR

<b>Factura</b>						
Pos	Cant.	UM	Referencia	Descripción	Precio/Un.	Precio Total
1	5,00	pcs	<b>Watlow No.:125H223A1A-1057</b>	Cable Heater straight	288,40	1442,00
			Ø 0.125" ( 3.18 mm ) Length: 223" (5664 mm), Voltage: 240V, Power: 3000W, Wattdensity: 34 W/inch² (5.27W/cm²), 36" (914.4mm ) fiberglass leads. Envío: D1302719 de fecha 15.07.2013	Harmonized Code: 85168080		
	1,00	pcs	<b>Watlow No.:Vers.-Pauschale</b>	Shipping and handling fee	45,00	45,00
			Envío: de fecha	Harmonized Code: .		
					Precio Neto	1487,00
					Impuestos	0,00
					<b>Total</b>	<b>1487,00</b>
					EUR	

*Figura P4: Factura de un calentador para la Universidad de Cádiz en 2013, “WATLOW”*

Como se indica en la memoria y en los anexos de cálculo, el calor que la caldera debe aportar es de 14,013 kW, por lo que debe escalarse en capacidad el calentador de la factura de la Figura P4, cuyo precio es de 288,4 €. Para ello, se utilizará la siguiente expresión:

$$C_B = C_A \cdot \left( \frac{Q_B}{Q_A} \right)^n \cdot \frac{\text{CEPCI (actual)}}{\text{CEPCI (precio año conocido)}}$$

Siendo:

- Q<sub>A</sub>: 3 kW
- Q<sub>B</sub>: 14,013 kW

- $C_A$ : 288,4 €
- $n$ : 0,6

$$C_B = 288,4 \cdot \left(\frac{14,013}{3}\right)^{0,6} \cdot \frac{797,6}{567,6} = 1021,8 \text{ €}$$

### 3. PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN MATERIAL

En este apartado se pretende calcular el Presupuesto de Ejecución Material (PEM) y el Presupuesto de Ejecución por Contrata (PEC). Para ello, se empleará la siguiente Tabla P6:

*Tabla P6: Valores típicos de factores para la estimación del PEM y el PEC, “Chemical Engineering Desing” de Coulson and Richardson, 4ª edición*

Item	Process type		
	Fluids	Fluids– solids	Solids
<b>1. Major equipment, total purchase cost</b>			
$f_1$ Equipment erection	0.4	0.45	0.50
$f_2$ Piping	0.70	0.45	0.20
$f_3$ Instrumentation	0.20	0.15	0.10
$f_4$ Electrical	0.10	0.10	0.10
$f_5$ Buildings, process	0.15	0.10	0.05
* $f_6$ Utilities	0.50	0.45	0.25
* $f_7$ Storages	0.15	0.20	0.25
* $f_8$ Site development	0.05	0.05	0.05
* $f_9$ Ancillary buildings	0.15	0.20	0.30
<b>2. Total physical plant cost (PPC)</b>			
PPC = PCE (1 + $f_1$ + ... + $f_9$ )			
= PCE ×	3.40	3.15	2.80
$f_{10}$ Design and Engineering	0.30	0.25	0.20
$f_{11}$ Contractor's fee	0.05	0.05	0.05
$f_{12}$ Contingency	0.10	0.10	0.10
Fixed capital = PPC (1 + $f_{10}$ + $f_{11}$ + $f_{12}$ )			
= PPC ×	1.45	1.40	1.35

\*Omitted for minor extensions or additions to existing sites.

PCE representa el precio de compra de los equipos principales, es decir, el coste total de los equipos determinados hasta el momento.

La planta diseñada se basa en un proceso en el que intervienen exclusivamente fluidos, por lo que el factor por el que el PCE debe multiplicarse es 3,40.

A continuación, se muestra una tabla para el cálculo estimatorio de la planta en cuestión, empleando los factores de la anterior Tabla P7:

*Tabla P7: Desglose del cálculo del presupuesto de ejecución general (PEG)*

<b>PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN MATERIAL Y EJECUCIÓN POR CONTRATA</b>			
Tipo de proceso: Involucra exclusivamente fluidos			
Coste de compra de todos los equipos principales			
127.474,80 €			
PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN MATERIAL (PEM) DESGLOSADO			
Desglose de costes		Coeficiente	Estimación económica (€)
<i>f</i> <sub>1</sub>	Instalación de equipos	0,40	50.989,92 €
<i>f</i> <sub>2</sub>	Tuberías	0,70	89.232,36 €
<i>f</i> <sub>3</sub>	Instrumentación	0,20	25.494,96 €
<i>f</i> <sub>4</sub>	Sistema eléctrico	0,10	12.747,48 €
<i>f</i> <sub>5</sub>	Edificaciones	0,02	1.912,12 €
<i>f</i> <sub>6</sub>	Utilities	0,50	63.737,40 €
<i>f</i> <sub>7</sub>	Almacenamiento	0,15	19.121,22 €
<i>f</i> <sub>8</sub>	Desarrollo	0,05	6.373,74 €
<i>f</i> <sub>9</sub>	Construcciones auxiliares	0,15	19.121,22 €
Presupuesto de ejecución material (PEM)			416.205,22 €
PRESUPUESTO DE EJECUCIÓN POR CONTRATA (PEC) DESGLOSADO			
Desglose de costes		Coeficiente	Estimación económica (€)
<i>f</i> <sub>10</sub>	Diseño e ingeniería	0,30	124.861,57 €
<i>f</i> <sub>11</sub>	Tasa del contratista	0,05	20.810,26 €
<i>f</i> <sub>12</sub>	Contingencias	0,10	41.620,52 €
Presupuesto de ejecución por contrata (PEC)			603.497,57 €
Impuesto sobre el valor añadido (IVA)			126.734,49 €
<b>Presupuesto de ejecución general (PEG)</b>			<b>730.232,06 €</b>

Por tanto, el presupuesto de ejecución general para la planta diseñada encargada de la eliminación de la corriente de residuos resultante del reciclado de fibras de carbono de la industria aeronáutica mediante un proceso de gasificación en agua supercrítica se estima en SETECIENTOS TREINTA MIL DOSCIENTOS TREINTA Y DOS EUROS CON SEIS CÉNTIMOS.

**DOCUMENTO 6:  
ESTUDIO DE  
SEGURIDAD Y  
SALUD**

## **ÍNDICE ESTUDIO DE SEGURIDAD Y SALUD**

1. ANTECEDENTES .....	3
2. OBLIGATORIEDAD .....	3
3. EMPLAZAMIENTO DEL PROYECTO Y LA OBRA .....	3
4. SERVICIOS E INSTALACIONES AUXILIARES DURANTE LA OBRA .....	4
5. EQUIPAMIENTO DE OBRA .....	5
6. EVALUACIÓN DE RIESGOS .....	6
6.1 CLASIFICACIÓN DE RIESGOS LABORALES .....	6
6.1.1 RIESGOS FÍSICOS .....	6
6.1.2 RIESGOS QUÍMICOS .....	7
6.1.3 RIESGOS BIOLÓGICOS .....	7
6.1.4 RIESGOS PSICOSOCIALES .....	8
6.2 RIESGOS GENÉRICOS DURANTE LA EJECUCIÓN DE OBRAS .....	8
6.3 ANÁLISIS DE RIESGOS DURANTE EL FUNCIONAMIENTO DE LA PLANTA .....	9
6.3.1 EXPLOSIÓN POR SOBREPRESIÓN EN EL SISTEMA .....	10
6.3.2 EXPOSICIÓN A TEMPERATURAS EXTREMAS .....	10
6.3.3 CONTACTOS ELÉCTRICOS .....	10
6.3.4 INCENDIOS .....	11
6.4 EQUIPO DE PROTECCIÓN INDIVIDUAL .....	11
7. LEGISLACIÓN APLICADA EN EL PRESENTE ESTUDIO .....	12
7.1 NORMATIVA GENERAL .....	12
7.2 NORMATIVA REFERIDA AL USO DE EPI's .....	12

## **1. ANTECEDENTES**

El Estudio de Seguridad y Salud que se expone en este apartado busca representar los riesgos y las posibles acciones correctivas a adoptar en materia de prevención de riesgos laborales. Este estudio se ha redactado para asegurar el cumplimiento del Real Decreto 1627/1997, de 24 de octubre, por el que se establecen disposiciones mínimas de seguridad y salud en las obras de construcción, en el marco de la Ley 31/1995, de 8 de noviembre, de Prevención de Riesgos Laborales (PRL), el cual tiene por objeto la determinación del cuerpo básico de garantías y responsabilidades preciso para establecer un adecuado nivel de protección de la salud de los trabajadores frente a los riesgos derivados de las condiciones de trabajo.

## **2. OBLIGATORIEDAD**

El cumplimiento del RD 1627/1997 se encuentra ubicado bajo el marco de la Ley 31/1995 de PRL, siendo un deber la elaboración del estudio en cuestión en cualquier proyecto siempre que se cumpla algún requisito de los siguientes:

- Que el presupuesto de ejecución por contrata incluido en el proyecto sea igual o superior a 450.758,07 euros.
- Que la duración estimada de la obra a ejecutar sea superior a 30 días laborables, empleándose en algún momento a más de 20 trabajadores simultáneamente.
- El volumen de mano de obra estimado, entendiéndose por tal la suma de los días de trabajo del total de los trabajadores en la obra, sea superior a 500.
- Se traten de obras de túneles, galerías, conducciones subterráneas o presas.

En caso de que se de alguno de los anteriores supuestos, el promotor del proyecto estaría en la obligación de elaborar un Estudio de Seguridad y Salud, cumpliendo así con el artículo 4. “Obligatoriedad del estudio de seguridad y salud o del estudio básico de seguridad y salud en las obras” del Real Decreto 1627/97, del 24 de octubre. Asimismo, en el mismo artículo se estipula que en el caso de no cumplir con ninguno de los requisitos anteriormente expuestos, podrá llevarse a cabo únicamente un estudio básico de seguridad y salud en las obras. A pesar de cumplir con el primer requisito, dada la naturaleza del presente Trabajo Fin de Grado, se opta por elaborar un estudio básico de seguridad para no extender en gran medida el proyecto. En dicho estudio básico se recogerán los aspectos fundamentales en materia de seguridad, identificación y minimización de riesgos.

## **3. EMPLAZAMIENTO DEL PROYECTO Y LA OBRA**

Como se indicó en la memoria del presente TFG, el proyecto se deberá desarrollarse en la siguiente localización:



*Figura ESSI: Vista satélite de la ubicación de la planta, Google Earth*

Con el objetivo de garantizar un buen funcionamiento de la planta, así como el correcto desarrollo de las obras necesarias para la construcción de la misma, se deben considerar los siguientes aspectos relevantes:

- Topografía del terreno. Nivelación del mismo.
- Recursos energéticos y abastecimiento hídrico.
- Edificaciones colindantes.
- Accesos a la obra.
- Servidumbres y condicionantes del proyecto.
- Sistema de saneamiento y gestión de residuos.

Asimismo, durante la realización del proyecto, deberán llevarse a cabo labores de albañilería, fontanería, acabados, instalación y puesta en marcha de equipos.

#### **4. SERVICIOS E INSTALACIONES AUXILIARES DURANTE LA OBRA**

En referencia a lo expuesto en el Anexo V del Real Decreto 1627/1997, se tienen que facilitar las siguientes instalaciones para poder ejecutar la obra bajo unas condiciones favorables para los trabajadores:

- Vestuarios o, en el caso de que los mismos no sean necesarios, los trabajadores deberán disponer de colgadores o armarios para colocar su ropa.
- Puntos de abastecimiento de agua potable, espejo, jabón y toallas individuales u otro sistema de secado con garantías higiénicas.

- Cuartos de baño con agua de temperatura regulable.
- Retretes, dotados de lavabos, situados en las proximidades de los puestos de trabajo, de los locales de descanso y de los vestuarios.

En el Anexo VI del mencionado RD 1627/1997 se exponen los requerimientos en cuanto a material y localización de los equipos de primeros auxilios:

- Los lugares de trabajo dispondrán de material de primeros auxilios en caso de accidente, que deberá ser adecuado, en cuanto a su cantidad y características, para el número de trabajadores y a los riesgos a los que estos estén expuestos.
- La distribución del material en el lugar de trabajo deberá garantizar que la prestación de los primeros auxilios sea eficiente y con la rapidez que requiera el tipo de daño previsible.
- Los locales de primeros auxilios contarán, como mínimo, con un botiquín, una camilla y una fuente de agua potable, estarán próximos a los lugares de trabajo y serán de fácil acceso para las camillas.
- El material y locales de primeros auxilios deberán estar claramente señalizados y ser de fácil acceso para todo el personal de obra y ajeno a la misma que pueda verse involucrado.

Además, en los puntos de trabajo de más de 50 trabajadores deberán disponer de un local destinado a los primeros auxilios y otras posibles atenciones sanitarias.

## **5. EQUIPAMIENTO DE OBRA**

Toda maquinaria y equipo involucrado durante la ejecución de la obra deberá estar sometido a su normativa específica. Asimismo, en todo caso, y a salvo de disposiciones específicas de la normativa citada, las instalaciones, máquinas y equipos deberán satisfacer las condiciones que se señalan en el presente apartado.

Las distintas instalaciones, máquinas y equipos, incluidas las herramientas manuales o sin motor, empleadas en la ejecución de la obra, deberán:

- Estar construidas respetando los principios de la ergonomía mínimos para el correcto cumplimiento de los objetivos sin comprometer, en el medio plazo, la integridad física del operario.
- Mantenerse en buen estado de funcionamiento.
- Utilizarse única y exclusivamente para los trabajos para los que han sido diseñados.
- Ser manejados por trabajadores que hayan recibido una adecuada formación para ello.

A continuación, se especifican algunos de los equipos complementarios que pueden ser necesarios durante el transcurso del proyecto, así como la normativa que deben cumplir los mismos:



- Andamios: Orden 2988/1988, de 30 de junio, en el que se especifican los requisitos mínimos para la instalación, empleo y mantenimiento de andamios tubulares.
- Escaleras: Se emplearán soportes no deslizantes para evitar posibles caídas.
- Equipamiento eléctrico: Se atenderá al Real Decreto 842/2002, de 2 de agosto, por el que se aprueba el Reglamento electrotécnico para baja tensión (BOE 18/09/02). El grado de protección deberá ser, como mínimo, tipo intemperie IP55.

Cabe mencionar que las instalaciones y los equipos a presión deberán ajustarse a lo expuesto en su normativa específica.

## **6. EVALUACIÓN DE RIESGOS**

A la hora de estudiar los posibles riesgos laborales que implican la ejecución de una obra, es necesario ser conscientes de la imposibilidad de la eliminación de todos los riesgos y que, por tanto, el objetivo prioritario será la minimización de los mismos. La evaluación de riesgos laborales es el proceso dirigido a estimar la magnitud de los riesgos que no hayan podido evitarse, proporcionando la información necesaria para decidir sobre la necesidad de adoptar medidas adecuadas para garantizar la seguridad y la protección de la salud de los trabajadores.

### **6.1 CLASIFICACIÓN DE RIESGOS LABORALES**

Los tipos de riesgos que existen típicamente en la ejecución de una obra se clasifican principalmente en riesgos físicos, químicos, biológicos y psicosociales.

#### **6.1.1 RIESGOS FÍSICOS**

Representa el tipo de riesgo más común durante la ejecución de una obra. Se trata de la posibilidad inminente de sufrir un daño corporal con o sin contacto directo. El riesgo físico en una obra es inherente a la propia actividad, es decir, no existirá obra alguna en la que el riesgo físico no exista. Los principales factores causantes de dicho riesgo son:

- Atmosféricos: Las condiciones climáticas a las que se ve sometido el operario durante la jornada laboral.
- Uso de herramientas y maquinaria pesada: Además del riesgo que supone el uso de maquinaria pesada, se tratan de equipos que durante su utilización generarán gran cantidad de ruido y vibraciones, generando un perjuicio en la salud del operario.
- Desarrollo de la actividad laboral en altura: En ciertas ocasiones será necesario trabajar a nivel, lo que, independientemente de la altura de la que se trate, conlleva cierto riesgo por la posibilidad de caídas con las consecuentes lesiones.

Los accidentes laborales asociados a riesgos físicos suelen acarrear el siguiente tipo de consecuencias:

- Muerte, fractura, rotura o torceduras debidas a caídas.
- Tendinitis, lumbago y hernias, producidas por la carga de excesivo peso de manera indebida de manera continua a lo largo del tiempo.
- Insolación, hipotermia o cansancio por fatiga. El hecho de trabajar en condiciones climáticas adversas, unido a la necesidad de llevar indumentaria especial, favorecen la aparición de los síntomas anteriormente mencionados.

## **6.1.2 RIESGOS QUÍMICOS**

El riesgo químico se produce por la exposición a agentes químicos, que pueden ocasionar efectos adversos en la salud del trabajador si no son manejados de la forma correcta. Es el tipo de riesgo más controlado por los expertos en materia de prevención de riesgos en una planta química, debido a la alta peligrosidad de las consecuencias derivadas de un accidente. Existe la posibilidad de sufrir lesiones directas, debidas al contacto directo de la sustancia química a través de la piel, y lesiones indirectas por inhalación de la sustancia.

Entre las consecuencias más comunes relacionados con los riesgos químicos para los trabajadores durante la construcción de un proyecto se encuentran las siguientes:

- Inflamación crónica de los bronquios.
- Silicosis producida por respirar partículas producidas en el corte de sílice.
- Problemas dermatológicos derivados del contacto directo con sustancias irritantes.
- Problemas neuromotores derivados de la inhalación de sustancias como pegamentos, pinturas o disolventes.

Sin embargo, por las características de la planta diseñada, durante el funcionamiento de la misma los riesgos químicos tendrán un peso mucho menor en el cómputo global. El proceso de GASC de fenol no genera sustancias peligrosas ni corrosivas y, a pesar de que el fenol sí se trata de una sustancia peligrosa, no se manipula en su forma pura, sino como parte de la corriente acuosa de desechos de la hidrólisis térmica de CFRP.

## **6.1.3 RIESGOS BIOLÓGICOS**

Es probablemente el riesgo laboral más olvidado cuando se elaboran las condiciones de seguridad en la obra, lo cual se debe, en gran parte, a que se tratan de riesgos imperceptibles para el operario (microorganismos).

Otras fuentes de peligro biológico podrían ser originadas por picaduras de insectos, mordeduras de diversos animales o el contacto directo con vegetación venenosa. En cualquier caso, se trata de un riesgo de difícil control y previsión.

## **6.1.4 RIESGOS PSICOSOCIALES**

El buen desempeño del trabajador está estrechamente relacionado con las interrelaciones que mantiene en el lugar de trabajo. Pasan numerosas horas de la jornada laboral con compañeros, las cuales pueden influenciar en gran medida el desempeño y bienestar del trabajador.

Malas relaciones interpersonales pueden ocasionar estrés y trastornos en la conducta profesional del trabajador. A esta problemática debe añadirse el propio desempeño laboral, que puede estar condicionado por una alta carga de trabajo, una alta exigencia y una deficiente ergonomía en las herramientas empleadas. Se trata de un riesgo laboral que podría influir sobre la correcta salud mental de los trabajadores, además de actuar en detrimento de la correcta ejecución de la obra, ya sea por errores humanos o retrasos en el avance de la misma.

## **6.2 RIESGOS GENÉRICOS DURANTE LA EJECUCIÓN DE OBRAS**

En el presente apartado se plantearán aquellos riesgos laborales que son inevitables en cualquier obra, aunque se pueden minimizar llevando a cabo las medidas correctivas adecuadas y la protección necesaria. A continuación, se presentan los riesgos genéricos en la ejecución de obras:

- Sufrir accidentes por caídas a nivel de suelo o a cierta altura. Fomentados por tropiezos y resbalones.
- Incendios.
- Caída de material al operario o sobre maquinaria, de forma que pudiera afectar directamente al operario.
- Posibles daños a alguna parte del cuerpo por proyecciones de partículas procedentes del trabajo con martillos electroneumáticos, así como problemas por el exceso de nivel de ruido producido por la misma operación.
- Cortes y heridas con objetos y maquinaria punzante.
- Daño ocular producido por la introducción de agentes extraños como son el polvo, la suciedad o cualquier otro elemento que sea perjudicial para la salud del trabajador.
- Corrientes eléctricas circulantes.
- Intoxicaciones o dermatitis derivadas del contacto directo con sustancias irritantes.
- Atropellos por maquinarias o vehículos ajenos a la obra (que circulan por la calle), durante las operaciones auxiliares necesarias que se efectúan fuera de la delimitación de la obra.

Las posibles acciones correctivas que pueden ejecutarse para minimizar el impacto de estos riesgos son:

- Mantener las zonas de paso lo más despejadas posibles.

- Los andamios deberán estar conformados por plataformas de, como mínimo, 60 cm de anchura y estas deberán estar sujetas de forma que no se pueden mover, tanto de sus apoyos, como dejar huecos libres entre los tablonos.
- Instalación de arquitectura auxiliar para facilitar el acceso.
- Uso de extintores de CO<sub>2</sub> o de polvo químico seco para el caso de incendio de sistemas eléctricos.
- Se manipularán los materiales en altura con cuidado, durante su elevación se prohibirá el paso de personas por debajo de las cargas, se evitará el acopio junto a huecos o bordes desprotegidos.
- Se utilizarán los equipos de protección personal, tales como casco, gafas de protección, pantalla de protección antipartículas, botas de seguridad, guantes, equipos de trabajo de manga larga, protectores auditivos y mascarilla para evitar la inhalación de polvo.
- Adecuada iluminación, calidad ambiental y nivel de ruido en la zona de trabajo.
- Ubicar correctamente la toma de tierra en la instalación eléctrica.
- Correcto adiestramiento de los operarios mediante cursos de formación.
- Se dispondrán vallas móviles acotando las zonas de trabajo, así como la señalización de tráfico correspondiente de “Peligro, Obras”, velocidad limitada y colocación de balizas luminosas en los puntos más exteriores.

### **6.3 ANÁLISIS DE RIESGOS DURANTE EL FUNCIONAMIENTO DE LA PLANTA**

Los principales riesgos que pueden llegar a producirse durante el funcionamiento de la planta de gasificación en agua supercrítica, diseñada en el presente TFG, son los siguientes:

- Explosión por sobrepresión en el sistema.
- Exposición a temperaturas extremas y/o contacto térmico.
- Contactos eléctricos.
- Incendios.

La zona de riesgo de incendios se concentra en el cuadro eléctrico, ya que por las características de la planta, el riesgo de incendio general es muy bajo. La corriente de residuos a tratar se encuentra bastante diluida y la temperatura de inflamación del fenol (compuesto muy mayoritario en dicha corriente y utilizado como compuesto modelo de la misma) es de 79 °C. Sí debe atenderse al correcto manejo de los gases producidos, al tratarse de gases altamente inflamables como son el H<sub>2</sub> y el CH<sub>4</sub>. Sin embargo, la separación de los distintos gases y su manejo no entran dentro de las competencias del presente TFG, por lo que tampoco se estudiarán en el ESS.

A continuación, se presentan las posibles medidas para reducir las posibilidades de que ocurra cualquiera de los riesgos anteriormente mencionados durante el funcionamiento normal de la planta:

### **6.3.1 EXPLOSIÓN POR SOBREPRESIÓN EN EL SISTEMA**

La planta diseñada opera en condiciones supercríticas, lo que implica que la presión de trabajo sea bastante elevada, alcanza en el punto inmediatamente posterior a la bomba una presión ligeramente superior a 250 bar. En esta circunstancia, a pesar de que se haya elegido un material lo suficientemente resistente y con el espesor adecuado para aguantar dicha presión, si ocurriese un fallo con la válvula BPR y se elevase la presión, el material de construcción podría no aguantar y estallar.

Con el objetivo de evitar dicho problema se instalará una válvula de control de presión que pueda actuar en el caso de una subida de presión, reduciéndola. Es indispensable el uso de manómetros, para que sea posible controlar la presión del interior del sistema, tanto por la válvula de control, como por los operarios, y que estos puedan abrir la válvula manualmente para que en caso de que esta primera falle, no se produzca una explosión. Además, la planta cuenta con varios discos de ruptura para evitar explosiones en caso de aumentos repentinos de presión.

La presión de operación es extremadamente elevada y una explosión por sobrepresión puede conllevar resultados catastróficos, por lo que queda justificado, sin duda, tomar todas las medidas de seguridad mencionadas anteriormente.

### **6.3.2 EXPOSICIÓN A TEMPERATURAS EXTREMAS**

Al tratarse de condiciones supercríticas, la temperatura del fluido es bastante alta y si se produce una fuga o se toca por error alguna tubería que no esté bien aislada (hecho que no debe ocurrir), el operario puede sufrir quemaduras severas. Para evitar dicho riesgo, se prohíbe el acceso a la zona de contacto directo con la planta. Asimismo, todas las conducciones, incluidos el reactor y el intercambiador de calor, permanecen aislados térmicamente cumpliendo con los requerimientos de diseño y la normativa vigente.

Para prevenir aún más el riesgo de quemaduras se suministrarán a los operarios que deban manipular o acceder a la zona de operación de la planta, equipos individuales de protección (EPI's).

### **6.3.3 CONTACTOS ELÉCTRICOS**

Todo el cableado debe estar aislado según la normativa vigente. Los cuadros eléctricos deben contar con dispositivos de protección contra sobrecargas y cortocircuitos, como los interruptores automáticos o los magnetotérmicos. Se incluirán, además, diferenciales y tomas de tierra correctamente ubicadas. Además, en el caso de que sean necesarias modificaciones en la planta para las que se precise de equipos eléctricos, los operarios deberán disponer del equipo de protección individual adecuado. Se deberá de desconectar de la red general cualquier elemento o

parte de instalación que vaya a ser manipulada, aunque se dispongan de elementos con el suficiente aislamiento.

### **6.3.4 INCENDIOS**

Como se ha mencionado anteriormente, en la planta de GASC del presente Trabajo Fin de Grado, existen dos focos principales de riesgo de incendio, el cuadro eléctrico y la corriente gaseosa de productos, una vez separada de la corriente acuosa.

El cuadro eléctrico debe hallarse en todo momento en perfecto estado y no se sobrecargará la red con una potencia superior a la de diseño. Siendo este un foco importante de incendio, la planta debe contar con, al menos, un extintor portátil o móvil como sistema de extinción que pueda ser proyectado y dirigido sobre el fuego por la acción de una presión inferior, es decir, que la presión en el interior del extintor sea superior a la atmosférica. Debido al artículo 8.3 del Anexo III del Reglamento para establecimientos industriales, no se permite el empleo de agentes extintores conductores de la electricidad sobre fuegos que se desarrollan en presencia de aparatos, cuadros, conductores y otros elementos bajo tensión eléctrica superior a 24 V. La protección de estos se realizará con extintores de dióxido de carbono, o polvo seco, cuya carga se determinará según el tamaño del objeto protegido con un valor mínimo de cinco kg de dióxido de carbono y seis kg de polvo seco.

Como se ha mencionado anteriormente, no se entra en las competencias del presente TFG el tratamiento de los productos gaseosos más allá de la separación de la fracción acuosa del efluente. Como normal general, la planta estará sujeta a lo establecido en el Real Decreto 681/2003, de 12 de junio, sobre la protección de la salud y la seguridad de los trabajadores expuestos a los riesgos derivados de las atmósferas explosivas en el lugar de trabajo.

### **6.4 EQUIPO DE PROTECCIÓN INDIVIDUAL**

Los equipos de protección individual, o EPI's, son cualquier dispositivo o medio que lleva o del que dispone una persona con el objetivo de que la proteja contra uno o varios riesgos que pueda suponer una actividad. Por tanto, se tratan de equipos que pueden proteger al trabajador contra la exposición a peligros físicos y químicos. Es importante ajustar el EPI en consecuencia a los riesgos con los que se trabaja o materiales con los que se pueda entrar en contacto. En rasgos generales, se incluye protección para los ojos, guantes, cobertura máxima de la piel y zapatos cerrados.

Para la planta del presente proyecto, se considerará que el equipo de protección individual consta de:

- Casco.
- Calzado de seguridad con suela de goma.
- Indumentaria de protección contra agentes químicos.

- Gafas que eviten proyecciones de cualquier tipo en ojos.
- Dispositivos de comunicación entre empleados de la planta.
- Vestimenta adecuada al trabajo desempeñado.
- Para trabajos en altura, arneses asegurados y reforzados.
- Para operarios que vayan a manipular o acceder a la zona de contacto directo con la planta, mono de trabajo aislante y guantes de goma gruesa para protegerlos de posibles quemaduras.

## **7. LEGISLACIÓN APLICADA EN EL PRESENTE ESTUDIO**

### **7.1 NORMATIVA GENERAL**

- Real Decreto 39/1997, de 17 de enero, por el que se aprueba el Reglamento de los Servicios de Prevención.
- Real Decreto 485/1997, de 14 de abril, sobre disposiciones mínimas en materia de señalización de salud y seguridad.
- Real Decreto 681/2003, de 12 de junio, sobre la protección de la salud y la seguridad de los trabajadores expuestos a los riesgos derivados de las atmósferas explosivas en el lugar de trabajo.
- Real Decreto 842/2002, de 2 de agosto, por el que se aprueba el Reglamento electrotécnico para baja tensión.
- Ley 31/1995, de 8 de noviembre, de Prevención de Riesgos Laborales.
- Real Decreto 1627/1997, de 24 de octubre, por el que se establecen las disposiciones mínimas de seguridad y salud en las obras de construcción.
- Real Decreto 286/2006, de 10 de marzo, sobre la protección de la salud y la seguridad de los trabajadores contra los riesgos relacionados con la exposición al ruido.
- Real Decreto 604/2006, de 19 de mayo, por el que se establecen las disposiciones mínimas de seguridad y salud en las obras de construcción.
- Orden 2988/1988, de 30 de junio, en el que se especifican los requisitos mínimos para la instalación, empleo y mantenimiento de andamios tubulares.

### **7.2 NORMATIVA REFERIDA AL USO DE EPI's**

- Real Decreto 1076/2021, de 7 de diciembre, sobre disposiciones mínimas de seguridad y salud relativas a la utilización por los trabajadores de equipos de protección individual.
- Real Decreto 1407/1992, de 20 de noviembre, por el que se regulan las condiciones para la comercialización y libre circulación intracomunitaria de los equipos de protección individual.
- UNE-EN 167:2002. Protección individual de los ojos.
- UNE-EN 363:2009. Equipos de protección individual contra caídas. Sistemas de protección individual contra caídas.
- UNE-EN ISO 20347:2013. Equipos de protección personal. Calzado de trabajo.

*Diseño de un reactor para la gasificación en agua supercrítica de subproductos del reciclado de fibras de carbono de la industria aeronáutica*

- EN 397:2012+A1:2012: Cascos de protección para la industria.



