

UNIVERSIDAD MAYOR DE SAN ANDRÉS

FACULTAD DE INGENIERIA

CARRERA DE INGENIERIA PETROLERA



PROYECTO DE GRADO

OBTENCION DEL 1,3-BUTADIENO A PARTIR DEL

N-BUTANO

POR: GUSTAVO SERGIO CHOQUE CONDORI

TUTOR: MSC. ING. JOSE DANIEL ALVAREZ GANTIER

LA PAZ – BOLIVIA

2021



**UNIVERSIDAD MAYOR DE SAN ANDRÉS
FACULTAD DE INGENIERIA**



LA FACULTAD DE INGENIERIA DE LA UNIVERSIDAD MAYOR DE SAN ANDRÉS AUTORIZA EL USO DE LA INFORMACIÓN CONTENIDA EN ESTE DOCUMENTO SI LOS PROPÓSITOS SON ESTRICTAMENTE ACADÉMICOS.

LICENCIA DE USO

El usuario está autorizado a:

- a) Visualizar el documento mediante el uso de un ordenador o dispositivo móvil.
- b) Copiar, almacenar o imprimir si ha de ser de uso exclusivamente personal y privado.
- c) Copiar textualmente parte(s) de su contenido mencionando la fuente y/o haciendo la cita o referencia correspondiente en apego a las normas de redacción e investigación.

El usuario no puede publicar, distribuir o realizar emisión o exhibición alguna de este material, sin la autorización correspondiente.

TODOS LOS DERECHOS RESERVADOS. EL USO NO AUTORIZADO DE LOS CONTENIDOS PUBLICADOS EN ESTE SITIO DERIVARA EN EL INICIO DE ACCIONES LEGALES CONTEMPLADAS EN LA LEY DE DERECHOS DE AUTOR.

DEDICATORIA

A mi papá Emilio.

AGRADECIMIENTO

Gracias a Dios por haberme dado sabiduría para tomar las mejores decisiones y bendecir todos mis proyectos, guiarme día a día para seguir adelante en buen camino.

Gracias a mi querida mamita Dionicia por haberme cuidado y alentado a seguir adelante cuanto no tenía fuerzas para seguir, por apoyarme en cada etapa de mis estudios.

Gracias papito Emilio por creer en mí y siempre tener una actitud positiva pese a los obstáculos que se nos presentaban, siempre me apoyo en cada etapa ante la situación que se encontraba.

Gracias a mis hermanos Oscar, Eddy, Rossio, Marco y Luis, saber que siempre estarán conmigo apoyándome en las buenas y en las malas.

A los amigos que esta universidad me permitió conocer, al plantel docente de ‘La Carrera de Ingeniería Petrolera’ por la dedicación en la enseñanza y la formación de futuros profesionales.

INDICE GENERAL

INDICE GENERAL	i
INDICE DE FIGURAS	vi
INDICE DE TABLAS	viii
RESUMEN EJECUTIVO	x
ACRONIMOS, SIMBOLOGIA Y ABREVIATURAS	xi
CAPÍTULO I GENERALIDADES	1
1.1. INTRODUCCIÓN	1
1.2. ANTECEDENTES	2
1.3. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	3
1.3.1. Identificación del problema	3
1.3.2. Formulación del problema.....	3
1.4. OBJETIVOS	4
1.4.1. Objetivo general.....	4
1.4.2. Objetivos específicos	4
1.5. JUSTIFICACIÓN	4
1.5.1. Justificación técnica	4
1.5.2. Justificación económica	4
1.5.3. Justificación social	5
1.6. ALCANCE	5
1.6.1. Alcance temático.....	5
1.6.2. Alcance geográfico	5
CAPITULO II FUNDAMENTOS TEÓRICOS DEL 1,3-BUTADIENO	6
2.1. EL MONOMERO 1,3-BUTADIENO	6
2.2. PROPIEDADES FISICAS Y QUIMICAS.....	7
2.3. APLICACIÓN DEL BUTADIENO	7

2.4. Métodos de Producción de 1,3-butadieno	10
2.5. Transporte del 1,3-butadieno.....	10
2.6. La petroquímica en Bolivia	12
CAPITULO III ESTUDIO DE MERCADO DEL 1,3 BUTADIENO	14
3.1. ESTUDIO DE MERCADO DEL 1,3 BUTADIENO A NIVEL MUNDIAL.....	14
3.1. OFERTA Y DEMANDA A NIVEL MUNDIAL DEL 1,3 BUTADIENO.....	14
3.2. ANALISIS REGIONAL.....	15
3.2.1. Europa del Este	15
3.2.2. Europa Oriental.....	16
3.2.3. Asia.....	17
3.2.4. Norte América	18
3.2.5. Medio oriente y África	19
3.3. BALANZA COMERCIAL DEL 1,3 BUTADIENO.....	19
3.4. DETERMINACIÓN DE LA DEMANDA POTENCIAL INSATISFECHA.....	20
3.5. VOLUMENES DE PRODUCCIÓN PARA EXPORTAR.....	21
3.6. PRECIO DEL 1,3-BUTADIENO.....	22
3.7. TARGET PARA LA EXPORTACIÓN DE 1,3-BUTADIENO.....	23
3.8. ANALISIS FODA EN LA PRODUCCION DE 1,3-BUTADIENO	24
CAPITULO IV LOCALIZACIÓN Y TAMAÑO DE LA PLANTA.....	26
4.1. LOCALIZACIÓN DE LA PLANTA	26
4.2. FACTORES DE LOCALIZACIÓN	26
4.2.1. Cercanía de la materia prima	26
4.2.2. Disponibilidad de materia prima	27
4.2.3. Cercanía del mercado.....	27
4.2.4. Medios y costos de transporte	27
4.2.5. Disponibilidad de energía eléctrica, agua y otros insumos	27
4.3. LOCALIZACIÓN DE LA PLANTA	27

4.3.1. Santa Cruz.....	27
4.3.2. Cochabamba	28
4.3.3. Tarija.....	28
4.3.4. Método cualitativo por puntos	28
4.5. TAMAÑO DE LA PLANTA.....	30
4.5.1. Factores que condicionan el tamaño del proyecto	30
4.6. DISPONIBILIDAD DE INSUMOS	30
4.7. TAMAÑO Y MERCADO	32
CAPÍTULO V INGENIERIA DEL PROYECTO.....	33
5.1. DESCRIPCION DE LOS PROCESOS PARA PRODUCIR 1,3-BUTADIENO	33
5.1.1. 1.3-Butadieno de las fracciones de C4 de craqueo	33
5.1.2. Deshidrogenacion de butanos y butenos	35
5.1.2.1. Deshidrogenacion de n-butano.....	36
5.1.2.2. Deshidrogenacion de n-butenos.....	37
5.1.3. Deshidrogenacion oxidativa de n-butano y n-buteno.....	38
5.1.3.1. Deshidrogenacion oxidativa de n-butano.....	38
5.1.3.2. Deshidrogenacion oxidativa de n-butenos	38
5.2. SELECCIÓN DEL PROCESO	40
5.3. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO O-X-D.....	41
5.4. Cinética química.....	43
5.4.1. La velocidad de reacción	43
5.4.2. Mecanismo de reacción	44
5.5. Catálisis.....	45
5.5.1. Catalizadores para la deshidrogenación oxidativa del n-butano.....	45
5.6. Diseño del reactor para obtener 1,3-butadieno.....	46
5.6.1. Reactor de lecho fijo	46
5.6.2. Reactor de flujo pistón	47

5.6.3. Diseño del reactor tubular de lecho fijo por el simulador Aspen Hysys v 8.8.	54
5.6.4. Resumen de resultados obtenido por el método analítico y el simulador Aspen Hysys v 8.8 en el diseño del reactor.	57
5.7. Simulación de la Planta de 1,3-Butadieno.	57
5.8. Seguridad Industrial y Medio Ambiente	62
5.8.1. Equipo de protección personal.....	63
5.8.2. La normativa según la OSHA.....	63
5.8.3. Primeros auxilios.....	63
5.8.4. Norma ISO 14001 Sistema de Gestión Ambiental.....	64
5.8.5. Contaminación del aire	65
5.8.5.1. Medidas contra incendios	66
5.8.6. Contaminación del suelo y agua	66
5.8.6.1. Medidas en caso de liberación ambiental	66
CAPÍTULO VI ANÁLISIS ECONÓMICO	68
6.1. INVERSIÓN TOTAL	68
6.2. COSTO DE PRODUCCIÓN	69
6.3. FLUJO DE CAJA.....	69
6.3.1. El valor actual neto	72
6.3.2. Tasa interna de retorno.....	72
6.3.3. Payback.....	73
CAPÍTULO VII CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES.....	75
7. 1. CONCLUSIONES.....	75
7.2. RECOMENDACIONES	76
BIBLIOGRAFÍA.....	77
Anexo A Simulación con el Software Aspen Hysys v 8.8 para una planta de 1,3-butadieno	82
Anexo B Diseño del reactor multitubular de lecho fijo de forma analítica.....	93

Anexo C	Costo de Maquinaria y Equipos del Proceso.....	100
----------------	---	------------

INDICE DE FIGURAS

Figura 2.1: Formula molecular del 1,3-Butadieno.....	6
Figura 2.2: Aplicaciones del uso final del butadieno.....	9
Figura 2.3: Medios de transporte del 1,3-butadieno licuado.....	12
Figura 2.4: Cadena de Industrialización de los compuestos del Gas Natural.....	13
Figura 3.1: Demanda mundial del 1,3 Butadieno por aplicación.....	14
Figura 3.2: Oferta y demanda del 1,3 butadieno en Europa del Este.....	15
Figura 3.3: Oferta y demanda del 1,3 butadieno en Europa Oriental.....	16
Figura 3.4: Oferta y demanda de 1,3 butadieno en Asia.....	17
Figura 3.5: Oferta y demanda de 1,3 butadieno en Norte América.....	18
Figura 3.6: Oferta y demanda de 1,3 butadieno en Medio Oriente y África.....	19
Figura 3.7: Balanza comercial del 1,3-butadieno.....	20
Figura 3.8: Exportación de 1,3-butadieno al mercado asiático.....	22
Figura 3.9: Precio del 1,3-butadieno.....	23
Figura 3.10: Target para exportar el 1,3-butadieno.....	24
Figura 4.1: Ubicación de la Planta de 1,3-butadieno.....	29
Figura 5.1: Diagrama del proceso para la recuperación de 1,3-butadieno de una corriente de C4.....	34
Figura 5.2: Diagrama del proceso de la producción de una corriente de C4 con butadieno.....	35
Figura 5.3: Proceso de Houdry Catadiene.....	37
Figura 5.4: Proceso Oxo-D.....	39
Figura 5.5: Diagrama de flujo en el proceso de obtención de 1,3-butadieno con el proceso O-X-D.....	42
Figura 5.6: Mecanismo de reacción para la deshidrogenacion oxidativa del n-butano.....	44
Figura 5.7: Reactor catalítico de lecho fijo-longitudinal.....	46
Figura 5.8: Reactor flujo pistón.....	56

Figura 5.9: Modelo de la planta con el simulador Aspen Hysys v 8.8 para la producción de 1,3-butadieno.....61

INDICE DE TABLAS

Tabla 2.1: Propiedades físicas y químicas del 1,3-Butadieno	7
Tabla 2.2: Aplicaciones de 1,3-butadieno.	8
Tabla 2.3: Caucho de síntesis.....	9
Tabla 2.4: Medios de transporte del 1,3-butadieno licuado.	11
Tabla 3.1: Demanda potencial insatisfecha de 1,3 butadieno	21
Tabla 3.2: Análisis FODA para la producción de 1,3-butadieno.	25
Tabla 4.1: Análisis de la ubicación de la planta por el método cualitativo por puntos.....	29
Tabla 4.2: Cromatografía del GLP	30
Tabla 4.3: Demanda insatisfecha proyectada hasta 2040	32
Tabla 5.1: Contenido en butadieno en porcentaje.....	33
Tabla 5.2: Temperatura de ebullición de las fracciones de C4.	34
Tabla 5.3: Deshidrogenación catalítica de butenos.....	37
Tabla 5.4: Ventajas y desventajas de los procesos para la producción de 1,3-butadieno.....	40
Tabla 5.5: Procesos de obtención de 1,3 butadieno.....	41
Tabla 5.6: Catalizadores utilizados para la deshidrogenacion oxidativa del n-butano.	45
Tabla 5.7: Ventajas y desventajas del reactor de flujo piston.....	47
Tabla 5.8: Datos de las corrientes de entrada al reactor.	48
Tabla 5.9: Entalpia de formación y capacidad calorífica en función de la temperatura.....	50
Tabla 5.10: Resultados del método de integración numérica.	53
Tabla 5.11: Factor de frecuencia y energía de activación de las reacciones.....	55
Tabla 5.12: Resultados obtenidos en el reactor de flujo pistón.	56
Tabla 5.13: Resultados del diseño del reactor de deshidrogenacion oxidativa del n-butano.	57
Tabla 5.14: Condiciones de la materia prima en la alimentación.....	58
Tabla 5.15: Condiciones de la mezcla de C4 y solución de amina.	59

Tabla 5.16: Condiciones de entrada de la mezcla de C4 y furfural a la columna de destilación extractiva.	60
Tabla 5.17: Normas importantes en la Seguridad Industrial y M.A.	62
Tabla 5.18: Medidas de primeros auxilios a los diferentes tipos de exposición.	64
Tabla 5.19: Concentración de 1,3-butadieno en el aire ante la ausencia de una fuente conocida.	65
Tabla 6.1: Costo de la inversión en la planta.	68
Tabla 6.2: Costo total de producción en el proceso de producción de 1,3-butadieno.	69
Tabla 6.3: Flujo de caja.	71

RESUMEN EJECUTIVO

El 1,3-butadieno es el principal producto para la producción del caucho estireno-butadieno, un producto final que a través de los años aumenta su demanda y su comercialización a nivel regional y mundial. En el presente proyecto tendremos 7 capítulos, desde su información general de este producto hasta si es viable implementar la planta de 1,3-butadieno en Bolivia.

En el Capítulo I y Capítulo II, se analizarán sus aspectos fundamentales del 1,3-butadieno, la justificación y los objetivos del proyecto.

Desde el Capítulo III empezaremos con los estudios de mercado a nivel regional y mundial, si se tiene a nivel mundial una demanda insatisfecha, o sobre oferta de este producto, el precio del 1,3-butadieno en las distintas regiones y el análisis FODA para la producción de este producto en nuestro país con el objetivo de exportar.

En el Capítulo IV se analizará la ubicación más favorable para la implementación de la planta para la producción del 1,3-butadieno, y también se analizará la capacidad que tendrá la planta.

En el Capítulo V realizaremos la simulación del proceso para obtener el 1,3-butadieno, el diseño del reactor para producir 1,3-butadieno a partir del n-butano y podrá compararse con el resultado obtenido en la simulación. tendremos el análisis de seguridad industrial ante la exposición a este compuesto y el estudio de medio ambiente al implementar esta planta,

En el capítulo VI se realizará el estudio económico al implementar la planta, si es viable o no este proyecto, analizaremos las variables económicas y el tiempo promedio de recuperación de la inversión.

En el capítulo VII realizaremos las conclusiones del proyecto y recomendaciones.

El anexo A tiene la finalidad de explicar cómo realizar la simulación de la planta de 1,3-butadieno en el simulador Aspen Hysys v 8.8.

El anexo B tiene el objetivo de realizar con detalle la deducción de ecuaciones en el diseño del reactor para obtener 1,3-butadieno, describiendo las variables en cada ecuación.

El anexo C se encuentra los costos de los equipos para realizar el análisis económico que se encuentra en el capítulo VI.

ACRONIMOS, SIMBOLOGIA Y ABREVIATURAS

ABS	Acrilonitrilo Butadieno Estireno
APA	Agencia de Protección Ambiental
BASF	Badische Anilin- und Soda-Fabrik
BD	1,3-Butadieno
BR	Caucho de Butadieno
C	Calificación
C5	Hidrocarburos con cinco o más carbonos
D	Demanda
DEA	Dietanolamina
DI	Demanda Insatisfecha
EPP	Equipo de Protección Personal
GLP	Gas Licuado de Petróleo
ISO	International Organization for Standardization
Kg	Kilogramos
M	Miles
MM	Millones
N	Numero de Tubos
NBR	Nitril Caucho
NMP	N Metil Pirrolidona
O	Oferta
OSHA	Occupational Health and Safety Management Systems
P	Peso
PS	Poliestireno

PVC	Cloruro de Polivinilo
RASH	Reglamento Ambiental para el Sector de Hidrocarburos
RASIM	Reglamento Ambiental para el Sector Manufacturero
SBR	Estireno –Butadieno-Caucho (Rubber)
SBS	Estireno Butadieno Estireno
TBC	Butil-Catecol-Terciario
TIR	Tasa Interna de Retorno
TM	Tonelada Métrica
VAN	Valor Actual Neto
$P_{C_4H_{10}}$	Presión parcial inicial del n-butano
P_{O_2}	Presión parcial inicial del oxígeno
R	Constante universal de los gases
$n_{prod.}$	Moles estequiométricos de los productos
$n_{react.}$	Moles estequiométricos de los reactivos
$n_{C_4H_{10}(R.L.)}$	Moles estequiométricos del reactivo limitante
$Y_{C_4H_{10}O}$	Composición inicial del reactivo limitante
X	Conversión del n-butano
C_{p_i}	Capacidad calorífica a presión constante
$\Delta H_{R_x}^\circ$	Entalpía estándar de formación
F_{O_2}	Flujo molar del oxígeno
$F_{C_4H_{10}}$	Flujo molar del n-butano
$-r_i$	Velocidad de reacción
k_i	Constante cinética

$P_{C_4H_{10}}$	Presión parcial del n-butano
P_{O_2}	Presión parcial del oxígeno
m, n	Constantes
E_{ai}	Energía de activación
R	Constante universal de los gases
T	Temperatura
ε	Factor de expansión
C_{O_2}	Concentración del oxígeno
$C_{C_4H_{10}}$	Concentración del n-butano
$C_{C_4H_{10_0}}$	Concentración inicial del n-butano
ϕ_{Tubo}	Diámetro del tubo
L	Longitud del reactor
$V_{reactor}$	Volumen del reactor
L	Longitud del reactor
M_i	Peso Molecular

CAPÍTULO I

GENERALIDADES

1.1. INTRODUCCIÓN

El 1,3-butadieno es un producto utilizado como materia prima en diversos procesos productivos en la cadena petroquímica de segunda generación. La mayor parte de esta producción es destinada a la síntesis de polímeros u otras moléculas que serán utilizadas en la fabricación de compuestos poliméricos y plásticos, que son muy importantes en el campo químico y petroquímico. (Mendoza Pompei, 2016)

El 1,3-butadieno es una sustancia química reactiva que puede dimerizarse a 4-vinilciclohexeno o, al exponerse al aire, formar peróxidos explosivos. Debido a su baja solubilidad en el agua y elevada volatilidad el 1,3-butadieno liberado se encuentra en su totalidad en la atmósfera. (Melnick, Shackelford, & Huff, 1993)

Este producto intermedio tiene una gran importancia en la industria química que se obtiene de fuentes fósiles. En el futuro es posible que se requieran fuentes nuevas para obtener 1,3-butadieno y sostenibles, estas nuevas rutas de síntesis para obtener 1,3-butadieno en presencia de dióxido de carbono utilizando óxido de vanadio como compuesto. (Iffländer, y otros, 2020)

La obtención de 1,3-butadieno a partir de la deshidrogenación de n-butano va aumentando, la investigación de otras estrategias factibles como: la formación de este compuesto sobre catalizadores basados en Sn, aumentar el rendimiento analizando la temperatura de reacción, la presión parcial del n-butano. (Zhang, y otros, 2020)

El proceso más utilizado en esta última década es la deshidrogenación oxidativa de n-butano a 1-buteno y 1,3-butadieno utilizando distintos catalizadores como el V-Mg-O y MgO-ZrO₂, los catalizadores empleados exhiben mejor rendimiento catalítico en la deshidrogenación oxidativa de n-butano. (Lee, y otros, 2012)

En Bolivia las políticas de industrialización de los hidrocarburos son superar el modelo que tenemos de país, el cual es exportador de materia prima como el gas natural para darle un mayor valor agregado a este, así generar empleos y desarrollo tecnológico, en el análisis económico demostraremos que la implementación de esta planta genera grandes ingresos al país.

1.2. ANTECEDENTES

El 1,3-butadieno, gas incoloro que se obtiene como producto secundario de la fabricación del etileno, es muy utilizado como materia prima para la fabricación de caucho sintético y resinas termoplásticas, con el transcurrir del tiempo las aplicaciones del 1,3-butadieno han aumentado en las distintas regiones. (Beliczky & Fajen, 1998)

Los primeros procesos industriales para obtener el 1,3-butadieno se basaron en productos que fueron derivados del carbón, como el acetileno, acetaldehído, etanol y formaldehído. En Alemania oriental parte del 1,3-butadieno se produce a partir del acetileno utilizando el níquel como catalizador en el proceso. (Weissermel & Arpe, 1981)

La obtención de 1,3-butadieno en sus inicios mediante un proceso de separación de la fracción de C₄, en los procesos de craqueo en las refinerías, esta fracción de C₄ contenía fundamentalmente butano, isobutano, olefinas y diolefinas, los cuales son buteno, 2-buteno, isobuteno y butadieno. (Eiroa Matinez, 2008)

Durante la Segunda Guerra Mundial, Eugene Houdry (1892-1962) desarrollo el proceso Houdry que consistía en la deshidrogenación de butanos sobre catalizadores Cr-Al fue ampliamente utilizado, además se podía aplicar este proceso en el propano y pentano. (Caicedo Realpe, 2008)

La obtención de 1,3-butadieno a partir de la conversión catalítica del etanol atrajo mucho la atención, la información no es amplia sobre su cinética de la síntesis, los catalizadores que se estudiaron en este proceso fue el ZrO₂-MgO-SiO₂, los modelos cinéticos se derivaron según el mecanismo de Langmuir-Hinshelwood y Eley-Rideal. (Cheng, Yan , Linlyn, & Zhongfeng, 2020)

A través del tiempo las tecnologías aumentaron y no solamente la materia prima era a partir del petróleo, se utiliza actualmente el n-butano a partir del fraccionamiento del gas natural, una de las tecnologías nuevas que se están implementando en las distintas regiones es el proceso O-X-D.

En la recuperación de 1,3-butadieno después del proceso de conversión se tiene una mezcla de n-butano, 1-buteno y 1,3-butadieno, componentes los cuales tienen temperaturas de ebullición cercanas y debido a esto se no se puede separar el 1,3-butadieno con una columna de destilación, cuando se tiene este tipo de mezclas se realiza la destilación extractiva con solventes como el NMP, Furfural y otros solventes líquidos. (Housan & Bellagi, 2013)

1.3. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

1.3.1. Identificación del problema

Una gran problemática de nuestro país es que solo se enfoca en exportar gas natural a países que están en el inicio de la explotación del gas natural a gran escala, como lo es Argentina con el campo Vaca Muerta podrá abastecer a toda su región y en los próximos años dejará de comprar gas a Bolivia, el mismo caso ocurre con Brasil, pero a diferencia de Argentina compra GNL de países de ultramar, razón por la cual está reduciendo la compra de gas natural de nuestro país.

En los próximos años prácticamente podríamos no tener mercados grandes como lo eran Brasil y Argentina hace 10 años, por esta razón debemos iniciar la industrialización de nuestro gas natural, se tiene proyectos para petroquímica del metano, etano y propano, pero no se tiene para el butano, una vez que se empiece la inversión Bolivia no dependerá de exportar gas a ningún país para la generación de ingresos.

Es muy importante conocer el mercado actual de butadieno y sus perspectivas futuras, a nivel mundial y regional. Conocer el comportamiento actual del mercado del butadieno es muy importante para cualquier inversión en el área. Además, un estudio de varios temas relacionados con el butadieno es fundamental para una mejor comprensión del mercado y sus tendencias.

1.3.2. Formulación del problema

La implementación de una planta de obtención de 1,3-butadieno con la finalidad de dar mayor valor agregado al gas natural, el cual exportamos a los mercados de Brasil y Argentina. El n-butano se obtiene del fraccionamiento del gas natural en las distintas plantas en nuestro país, tenemos plantas con gran capacidad de procesamiento para obtener materia prima para productos petroquímicos.

El bajo costo de los alcanos ligeros, su disponibilidad y el hecho de que son ambientalmente aceptables debido a su baja reactividad química ha impulsado su uso como materia prima para la industria química. Debido a esto existe un gran potencial para su conversión de hidrocarburos saturados a hidrocarburos insaturados, los cuales pueden ser por la deshidrogenación y la oxideshidrogenación, ya que en la industria petroquímica es una de las materias primas importantes.

1.4. OBJETIVOS

1.4.1. Objetivo general

Analizar la factibilidad en la implementación de una planta para obtener 1,3-butadieno a partir del n-butano.

1.4.2. Objetivos específicos

- Describir los mercados que se tiene tanto a nivel regional como a nivel mundial.
- Analizar las variables que intervienen en el diseño de los reactores para obtener el mayor grado de conversión.
- Diseñar el reactor para obtener 1,3-butadieno mediante el método analítico.
- Comparar el resultado obtenido mediante el método analítico con el simulador Aspen Hysys v 8.8.
- Analizar los resultados obtenidos analíticamente con los obtenidos mediante el simulador Aspen HYSYS.
- Mostrar la Simulación de la planta de 1,3-butadieno a partir de n-butano.
- Realizar el análisis técnico-económico en la obtención del 1,3-butadieno.

1.5. JUSTIFICACIÓN

1.5.1. Justificación técnica

En la producción de 1,3-butadieno se empleará del proceso Houdry que consta de dos pasos, el primero es la deshidrogenación oxidativa de n-butano a n-butenos y 1,3-butadieno, y el segundo la deshidrogenación oxidativa del n-buteno para la obtención del butadieno, debido a que en nuestro país la materia prima es el gas natural y en un análisis de costos nos saldría más económico que la materia prima nafta o gasóleos.

1.5.2. Justificación económica

El butadieno es la base para productos de consumo, los cuales son componentes importantes para los materiales de construcción, automóviles y otros, razón por la cual el butadieno es un producto con una demanda en los países que tienen fábricas de las diversas aplicaciones.

La generación de mayores ingresos al país por concepto de comercialización de 1,3-butadieno en volúmenes considerables, permitiría obtener una mayor utilidad a la materia prima que tenemos en nuestro país.

1.5.3. Justificación social

La producción de 1,3-butadieno en nuestro país podría generar empleos directos e indirectos, también es un paso más para el avance de la petroquímica básica que se tendrá en Bolivia, debido a que podremos exportar este producto petroquímico básico a países del continente americano, asiático, europeo, etc.

1.6. ALCANCE

1.6.1. Alcance temático

En este proyecto se analizará cada etapa del proceso para obtener el 1,3-butadieno. De acuerdo a la bibliografía del tema y a los datos obtenidos de valores bibliográficos se completará el diagrama del proceso del butadieno. Mediante el simulador Aspen Hysys v 8.8, donde se interpretará las variables en cada equipo.

En el simulador Aspen Hysys v 8.8 se realizará los balances de materia y energía respectivos, con el fin de realizar un estudio económico del proyecto con el objetivo de analizar la recuperación de la inversión en esta planta.

1.6.2. Alcance geográfico

La implementación de una planta de 1,3-butadieno en Bolivia tiene como objetivo principal abastecer la demanda de países vecinos y el continente asiático. Bolivia puede ser competencia para el país vecino Brasil que también produce este producto.

CAPITULO II

FUNDAMENTOS TEÓRICOS DEL 1,3-BUTADIENO

2.1. EL MONOMERO 1,3-BUTADIENO

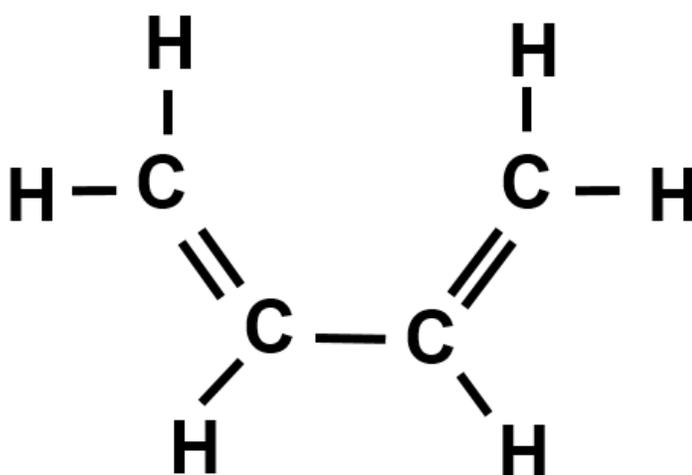
El 1,3-butadieno es una diolefina, es decir, un hidrocarburo con dos dobles enlaces, que están separados por un enlace entre C-C sencillo (dobles enlaces conjugados), el butadieno es el homólogo inferior al isopreno (=metilbutadieno). (Mayer, 1987)

El 1,3-butadieno es un monómero importante que se utiliza como materia prima en una variedad de cauchos sintéticos y resinas poliméricas. Es un dieno conjugado simple, con la fórmula molecular C₄H₆. A temperatura ambiente es un gas incoloro, inflamable e irritante. (Backes, 2011)

El 1,3-butadieno es utilizado principalmente como monómero en la producción de una variedad de polímeros y copolímeros. También se utiliza como intermedio en la producción de varios productos químicos. El 1,3-butadieno es un producto importante de la industria petroquímica y un componente importante para muchos productos de consumo e industriales, el mayor uso del butadieno se encuentra en la producción de caucho sintético. (White, 2007)

La configuración espacial del 1,3-butadieno se ilustra en la figura 2.1.

Figura 2.1: Fórmula molecular del 1,3-Butadieno.



Fuente: (American Chemistry Council, 2019)

En la figura 2.1, tenemos la estructura del 1,3-butadieno, este compuesto es un gas incoloro, a condiciones de temperatura ambiente, sustancia química peligrosa debido a su inflamabilidad, reactividad y toxicidad.

2.2. PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS

El 1,3-butadieno se distribuye en la atmosfera en estado gaseoso, es degradado principalmente por los radicales hidroxilos, y en menor medida por ozono, radicales nitrato y oxígeno. Sus productos de degradación son la acroleína y el formaldehído. (Bisson, Boulvert, Dallet, Hulot, & Marliere, 2019)

En la tabla 2.1 se pueden encontrar los datos adicionales sobre las propiedades físicas del 1,3-butadieno.

Tabla 2.1: Propiedades físicas y químicas del 1,3-Butadieno.

Propiedades	Unidades	Valores
Peso Molecular	[g/mol]	54,09
Punto de Inflamación	[°C]	-71
Punto de Fusión/Congelación	[°C]	-109
Punto de Ebullición	[°C]	-4,5
Presión de Vapor a 20 °C	[mmHg]	910
Calor de Combustión a 25 °C	[cal/g]	10.560
Tensión Superficial a 20 °C	[dinas/cm]	13,4
Densidad min. a 4 °C	[g/cm ³]	0,63
Autoflamabilidad	[°C]	420
Límite de inflamabilidad en el aire	[% en volumen]	2-11,5
Solubilidad del agua a 20 °C	[%]	0,05
Índice de refracción a 20 °C		1,4293
Viscosidad a 25 °C	[cPo]	0,16

Fuente: (American' Chemistry Council, 2019)

2.3. APLICACIÓN DEL BUTADIENO

La mayor cantidad del butadieno se usa en la producción de polímeros o productos químicos intermedios que se utilizan en la producción de polímeros. Estos polímeros se utilizan en una amplia variedad de productos de consumo e industriales que brindan enormes beneficios a la sociedad. El 1,3-butadieno se utiliza principalmente en la fabricación de cauchos sintéticos como caucho de butadieno-estireno, caucho de polibutadieno, látex de butadieno- estireno, resinas. (Bisson, Boulvert, Dallet, Hulot, & Marliere, 2019)

Puesto que posee varios centros de reactividad, el butadieno participa en numerosas reacciones, sobre todo, en las de adición y ciclación que llevan a síntesis de importantes productos intermedios.

Tabla 2.2: Aplicaciones de 1,3-butadieno.

Aplicación	Características
SBR	Producido por la polimerización del estireno y del butadieno, el principal uso es para neumáticos. Este material también es utilizado en adhesivos y sellantes, revestimientos para cables, alambres y muchos otros artículos de caucho tales como las suelas de zapatos.
PB	Producido por la polimerización del butadieno, algunos de los usos de este producto son materia prima para neumáticos, producto intermedio en la producción de acrilonitrilo-butadieno, estireno (ABS).
SBL	Se trata de una dispersión acuosa estable, que contiene partículas de polímero de alrededor de 0.05 a 5 micras de diámetro. Se utiliza en aplicaciones de goma, espumas, adhesivos, selladores y revestimiento de papel.
Resinas ABS	Mezclas de copolímeros acrilonitrilo-estireno con caucho butadieno-acrilonitrilo, para la fabricación de tuberías, juguetes, maletas, teléfonos, muebles.
NBR	Producido por la copolimerización de acrilonitrilo y butadieno. Este material se utiliza en una gran variedad de productos incluyendo las mangueras, líneas de combustible, piezas de automóviles, sellos de juntas, látex, adhesivos estructurales, guantes y calzado.
MBS	Polímero de metilmetacrilato, butadieno y estireno. Se utiliza como modificador del impacto para resinas de PVC.
SBS y SEBS	Los bloques de estireno, butadieno y estireno se polimerizan para formar estireno-butadieno-estireno (SBS), del mismo modo los bloques de estireno, etileno/butileno y forma los copolímeros en bloque de estireno SEBS.

Fuente: Elaboración propia en base a (American' Chemistry Council, 2019).

A los productos mencionados en primer lugar corresponden a una serie de elastómeros, que según como polimericen pueden ser elásticos, estables a la abrasión, al desgaste, al frío y al calor, así como estables a la oxidación, al envejecimiento y a los disolventes.

Como monómero de copolimerización con butadieno se emplean preferentemente estireno y acrilonitrilo. Para la clasificación de los elastómeros se usa un código con la denominación "rubber". Las tres clases más importantes de caucho son:

- SBR: estireno –butadieno-caucho (rubber).
- BR: caucho de butadieno(1,4-cis-polibutadieno).
- NBR: nitril-caucho (copolímero de butadieno-acrilonitrilo).

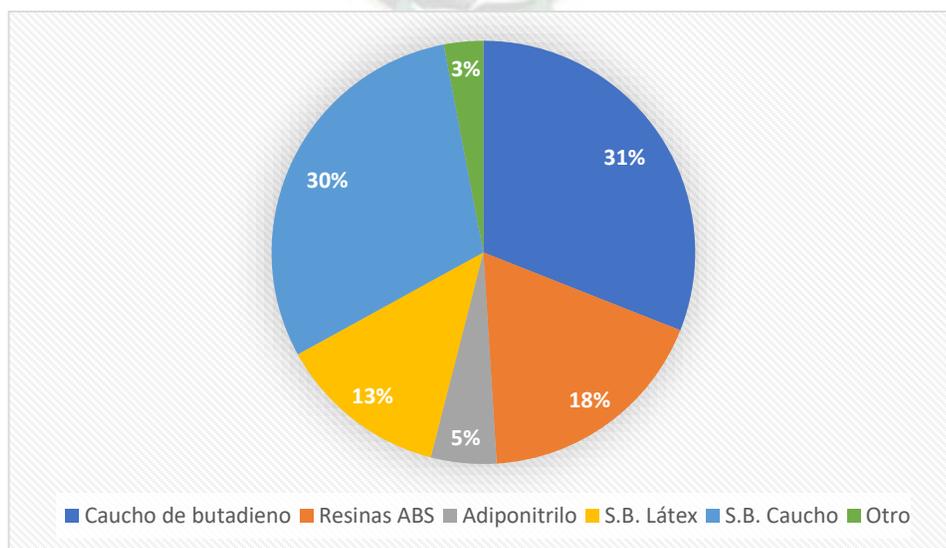
Tabla 2.3: Caucho de síntesis.

Producto	E.E.U.U.	Europa Occidental		Mundo
	1976	1976	1978	1978
Caucho estireno-butadieno (SBR)	57	58	54	58
Caucho polibutadieno (BR)	16	13	14	15
Caucho cloropreno (CR)	8	6	6	6
Caucho de olefinas (EPM, EPDM)	6	5	6	5
Butilcaucho (IIR)	5	7	7	6
Caucho poliisopreno (IR)	3	5	6	4
Nitril-caucho (NBR)	3	4	5	5
Otros	2	2	2	1
Producción Total [MM ton]	2.24	1.51	1.58	1

Fuente: K. Weissermel /H.-J. Arpe (1981)

El butadieno actualmente gana creciente importancia como producto intermedio. Así se obtiene el cloropreno, a través del producto de adición con cloro, el 3,4 dicloro 1-buteno, que por eliminación de HCL da lugar al mismo, y por hidrocianuración, es decir, adición duplicada de CNH, se obtiene el adiponitrilo. También se puede transformar en 1,4 butanodiol mediante diferentes etapas intermedias.

Figura 2.2: Aplicaciones del uso final del butadieno.



Fuente: Elaboración propia con datos de Jacobs Consultancy Ltd.

La demanda mundial del butadieno en 2010 a diferencia del año 1974, cambio el porcentaje de aplicación donde se utiliza mayor materia prima de butadieno para el polibutadieno. Las aplicaciones del uso final del butadieno en el año 2014 nos indica que se utiliza el butadieno como materia prima para el caucho de butadieno. En el 2018 aproximadamente el 25% de la producción de 1,3-butadieno fue destinada a la producción de caucho de polibutadieno. (American' Chemistry Council, 2019)

2.4. Métodos de Producción de 1,3-butadieno

Se tiene tres métodos principales para obtener 1,3-butadieno, dos son procesos de deshidrogenación de n-butano y n-buteno, la más utilizada es la tercera ruta es como coproducto en la fabricación de etileno. Todos los procesos requieren la recuperación final del 1,3-butadieno mediante el proceso de destilación extractiva. (Miller, 1978)

El 1,3-butadieno también se puede obtener directamente, por deshidrogenación o deshidrogenación oxidativa de una fracción C4 de la destilación bruta, usando cromo alúmina como catalizador. En Europa, se cree que toda la producción de 1,3-butadieno se realiza mediante el craqueo al vapor de los hidrocarburos (Institute for Health and Consumer Protection, 2002).

El craqueo al vapor de hidrocarburos parafínicos, como subproducto de la fabricación de etileno, representa el 95% de la producción mundial de 1,3-butadieno. El vapor craqueo es un proceso petroquímico que consiste en la pirólisis de hidrocarburos saturados a partir de gas natural o petróleo, en presencia de vapor de agua y a una temperatura entre 790 y 830 ° C. Primero produce etileno, pero también propileno y, en segundo lugar, un corte C4 rico en butadieno y un corte C5 (hidrocarburos con cinco o más carbonos) con alto contenido de aromáticos y más particularmente en benceno. (Bisson, Boulvert, Dallet, Hulot, & Marliere, 2019)

En el capítulo V se describe los procesos de obtención de 1,3-butadieno utilizando esquemas del proceso.

2.5. Transporte del 1,3-butadieno

El 1,3-butadieno se transporta por diferentes medios los cuales son: oleoductos, barco, cisternas, debido a que a temperatura ambiente se encuentra en estado gaseoso, la manipulación de este compuesto se maneja como gas licuado bajo presión durante el transporte. (Morrow, 1990)

Durante el transporte del 1,3-butadieno es muy importante inhibir este compuesto con butil-catecol-terciario (TBC) con el objetivo de minimizar la formación de peróxidos. (American' Chemistry Council, 2019)

Se tiene diferentes maneras para el transporte del 1,3-butadieno los cuales se tiene en la tabla 2.4.

Tabla 2.4: Medios de transporte del 1,3-butadieno licuado.

Medio de Transporte	Características
Vagones de ferrocarril	El butadieno licuado se envía en vagones de cisterna presurizados, estos tanques tienen una capacidad aproximadamente de 114 metros cúbicos, el butadieno licuado se carga y descarga desde la parte superior del tanque.
Camiones cisterna	Los camiones cisterna utilizados para transportar butadieno licuado, los cuales están equipados con bombas de descarga automática a diferencia de los tanques en los vagones de ferrocarril.
Buques marinos	El butadieno licuado se puede transportar en forma segura en contenedores presurizados para envíos marítimos, por vías navegables y costeras, estos buques están especialmente equipados para transportar butadieno de forma segura. Es muy importante inhibir el butadieno, en las operaciones de carga y descarga se debe controlar reduciendo la exposición de los empleados y las emisiones ambientales.
Contenedor de líquidos	Estos contenedores de líquidos también son denominados como tanques ISO los cuales se pueden enviar por camión, ferrocarril o transporte marítimo. La carga y descarga de butadieno en contenedores ISO debe realizarse solo después de una revisión cuidadosa, requiriendo de equipos y procedimientos de manipulación especiales.
Oleoductos	El butadieno también se envía por oleoductos, los oleoductos son monitoreados continuamente durante el transporte desde que ingresa a la tubería hasta que sale de ella, el objetivo es encontrar posibles fugas, actividad de construcción y otros factores que afectan la integridad de la tubería, una de las señales de fuga es la vegetación muerta por el área.

Fuente: Elaboracion propia en base a (American' Chemistry Council, 2019)

En la figura 2.3 podremos observar los medios de transporte de 1,3-butadieno en el medio terrestre y acuático.

Figura 2.3: Medios de transporte del 1,3-butadieno licuado.



Fuente: Elaboración propia.

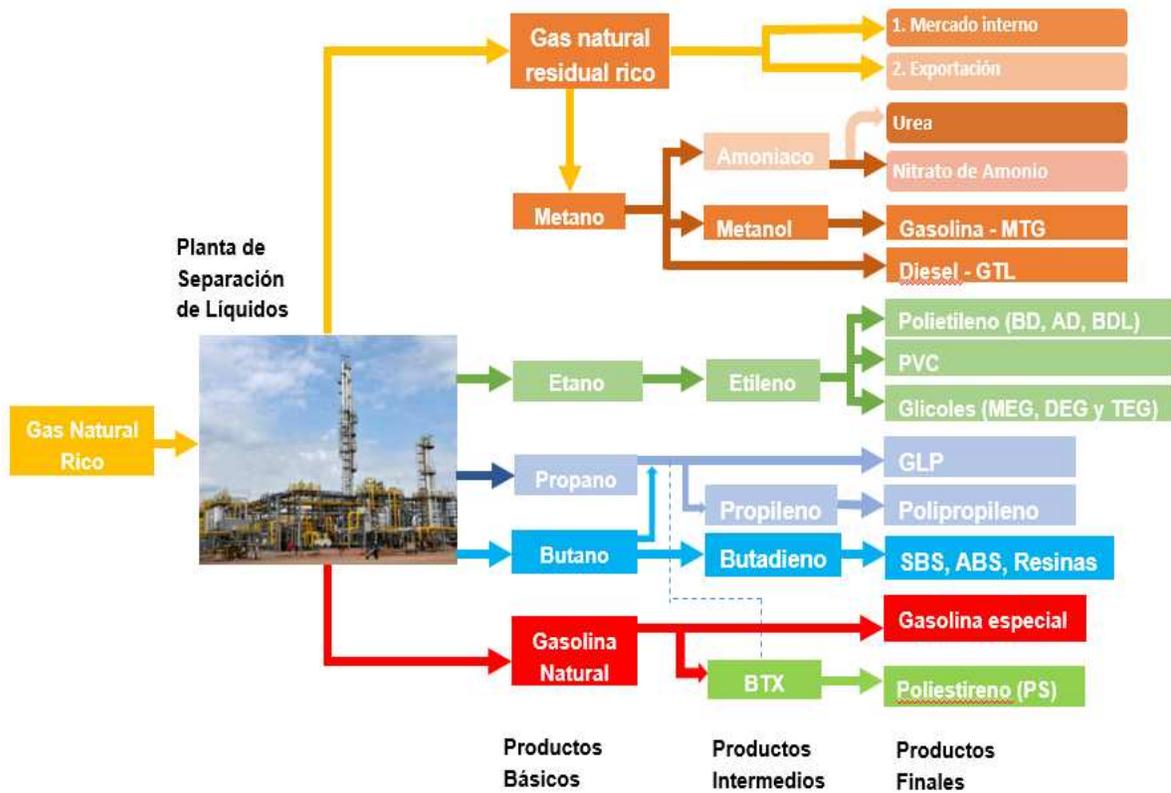
2.6. La petroquímica en Bolivia

La industria petroquímica en Bolivia es de vital importancia para el desarrollo y crecimiento económico del país, desde su transformación en productos petroquímicos básicos hasta los productos finales se agrega valor agregado a la materia prima. Bolivia cuenta con la materia prima para industrializar los diversos compuestos del gas natural. Bolivia en el pasado siglo por la falta de información, inversión e infraestructura no se pudo desarrollar la industrialización de la materia prima, las ventajas de implementar complejos petroquímicos son:

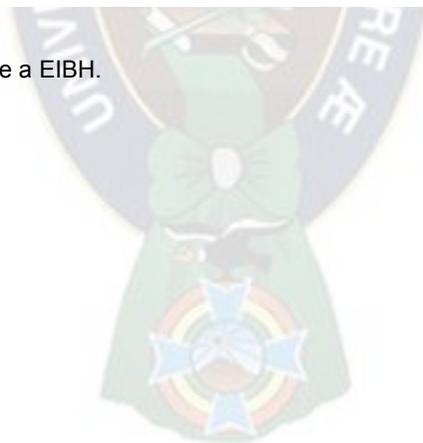
- Bajo costo de la materia prima
- Competitividad con los países vecinos.
- Desarrollo del país.
- Generación de empleos para los bolivianos.

En el IV congreso Internacional organizado por YPFB, Christopher Geisler, vicepresidente de IHS Chemicals Consulting y Cleantho De Paiva Leite ejecutivo de Braskem indicaron que el escenario actual de industrialización en Bolivia es muy importante ante las oportunidades para industrializar el gas y continuar implementando plantas petroquímicas, indicando la importancia de invertir en infraestructura, recursos humanos y tecnología, para desarrollar importantes proyectos futuros que sean viables. (YPFB,2019)

Figura 2.4: Cadena de Industrialización de los compuestos del Gas Natural.



Fuente: Elaboración propia en base a EIBH.



CAPITULO III

ESTUDIO DE MERCADO DEL 1,3 BUTADIENO

3.1. ESTUDIO DE MERCADO DEL 1,3 BUTADIENO A NIVEL MUNDIAL

En 2018 la demanda mundial de butadieno fue de 12.297 [kton], dentro de los cuales se observó que el 1,3 butadieno tiene alta demanda debido al consumo de sus derivados en India y China, en la figura 3.1 se tiene una gráfica de las aplicaciones del 1,3 butadieno a nivel mundial hasta el 2018.

Figura 3.1: Demanda mundial del 1,3 Butadieno por aplicación.



Fuente: Elaboración propia con datos de Prismane Consulting

La demanda de butadieno está dominada por la producción de elastómeros de caucho y látex, para servir a su mercado principal, SBR y cauchos de polibutadieno. Esto representa más del 70% de la demanda mundial de butadieno.

Actualmente de los derivados del 1,3 butadieno el caucho estireno-butadieno (SBR) y el caucho de polibutadieno, son las aplicaciones con mayor crecimiento y esto se debe al incremento de Asia en la capacidad de producción de estos derivados.

3.1. OFERTA Y DEMANDA A NIVEL MUNDIAL DEL 1,3 BUTADIENO.

La demanda mundial del 1,3-Butadieno en el año 2000 fue de aproximadamente 8 millones de toneladas. El cual creció alrededor de un 3.6% anual hasta el año 2007, impulsada principalmente por la demanda asiática, después de la cual la crisis económica afectó al

mercado con una disminución en la demanda de -2,8% y -1,4% en 2008 y 2009, respectivamente.

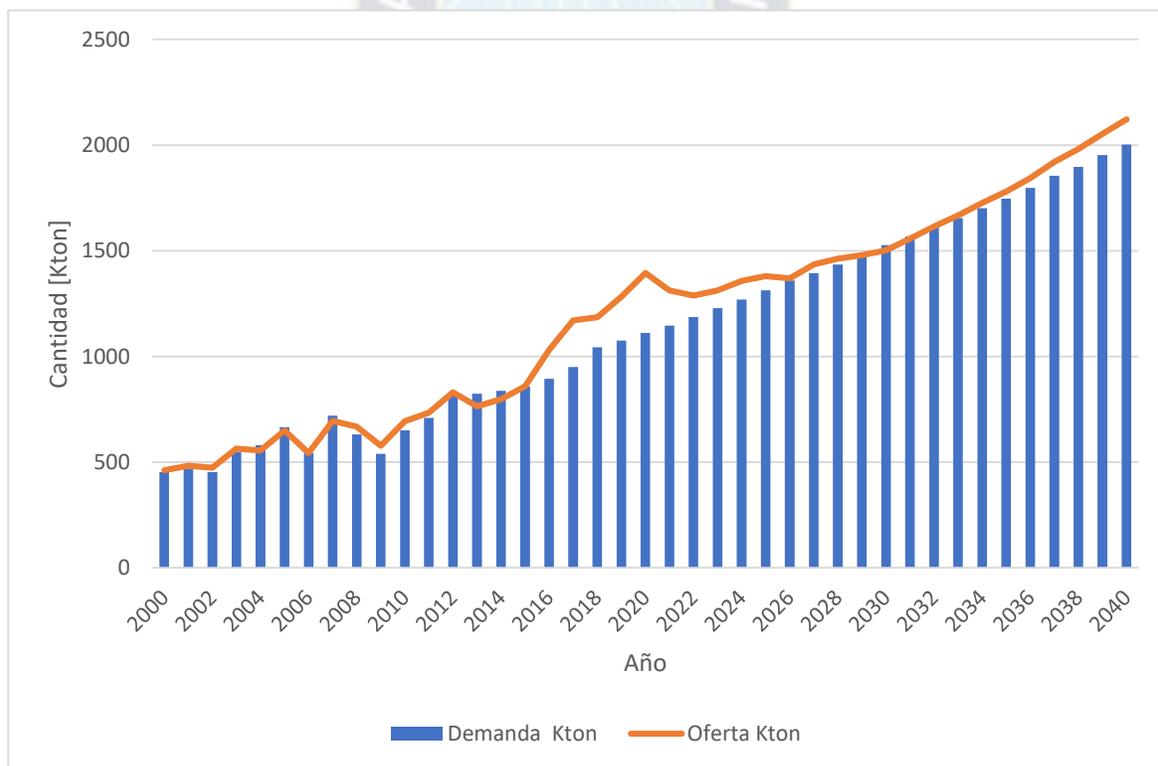
En 2010 la demanda se recuperó, creciendo un 7,4% mientras que en 2011 la demanda creció un 4,6%. en 2012 la demanda se contrajo un 0,9% y un 2.2% en 2013. la demanda creció 1,7% en 2014. En 2018 esta demanda ascendió hasta 12.296,5 [kton].

La oferta y demanda del 1,3 butadieno a nivel mundial en los últimos años y su proyección hasta 2040 se explicará más con el balance de la oferta y demanda. Es importante notar la caída en la producción debido a la crisis del 2009, también que Europa occidental tuvo una disminución significativa entre 2000 y 2007.

3.2. ANALISIS REGIONAL

3.2.1. Europa del Este

Figura 3.2: Oferta y demanda del 1,3 butadieno en Europa del Este.



Fuente: Elaboración propia con datos de Jacobs Consultancy Ltd.

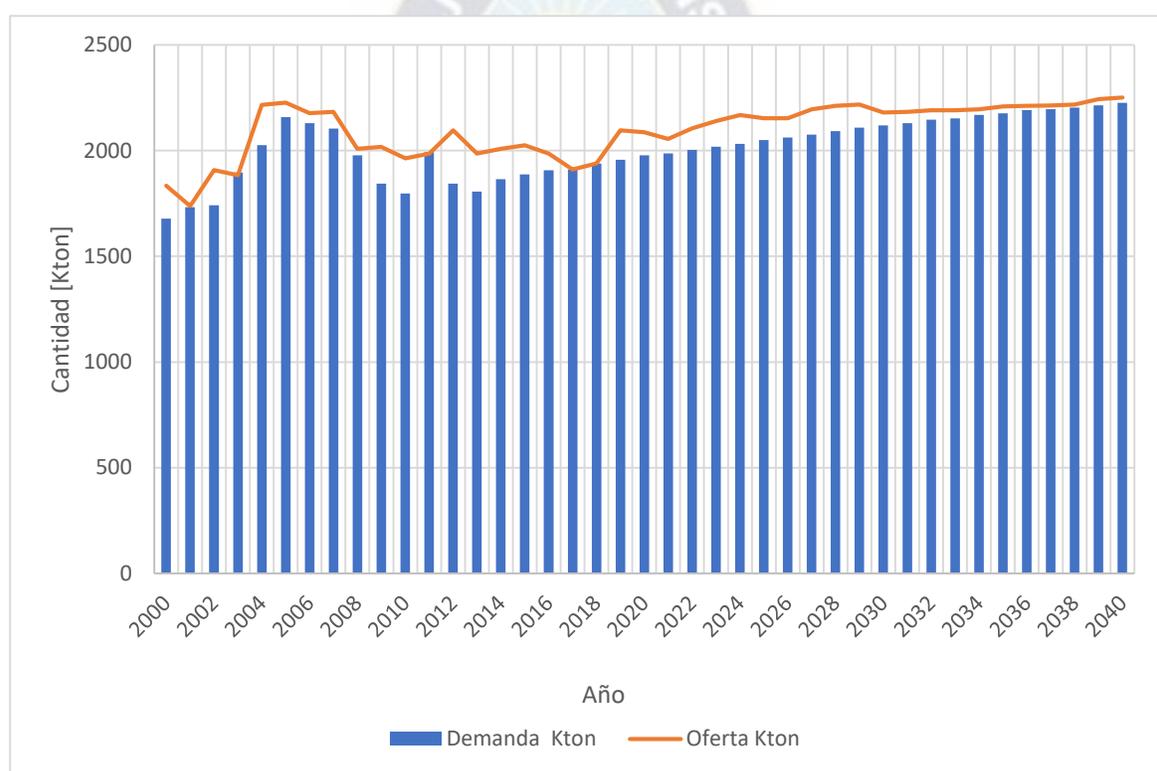
La tasa de crecimiento en la demanda anual promedio de Europa del Este para el periodo 2000 a 2014 fue del 4,4% anual, la cual fue impulsada por la demanda de SBR y caucho de

polibutadieno. Debido a que entre el 2000 y 2007 creció un 6,9% anual, la cual decreció por la recesión económica del 2008, la demanda disminuyó un 11,8% en 2008 y 14,3% en 2009, la cual se fue recuperando en una tasa del 19,9% en 2010 y 9,4% en 2011.

Entre los años 2014 y 2019 se hizo proyectos para la construcción de nuevas plantas de producción de 1,3 butadieno en Hungría con una capacidad de 130 [Kton] y aumento en el rendimiento de la producción de las plantas ya existentes elevo la producción, para cambiar el balance de la oferta y demanda del 1,3 butadieno.

3.2.2. Europa Oriental

Figura 3.3: Oferta y demanda del 1,3 butadieno en Europa Oriental.



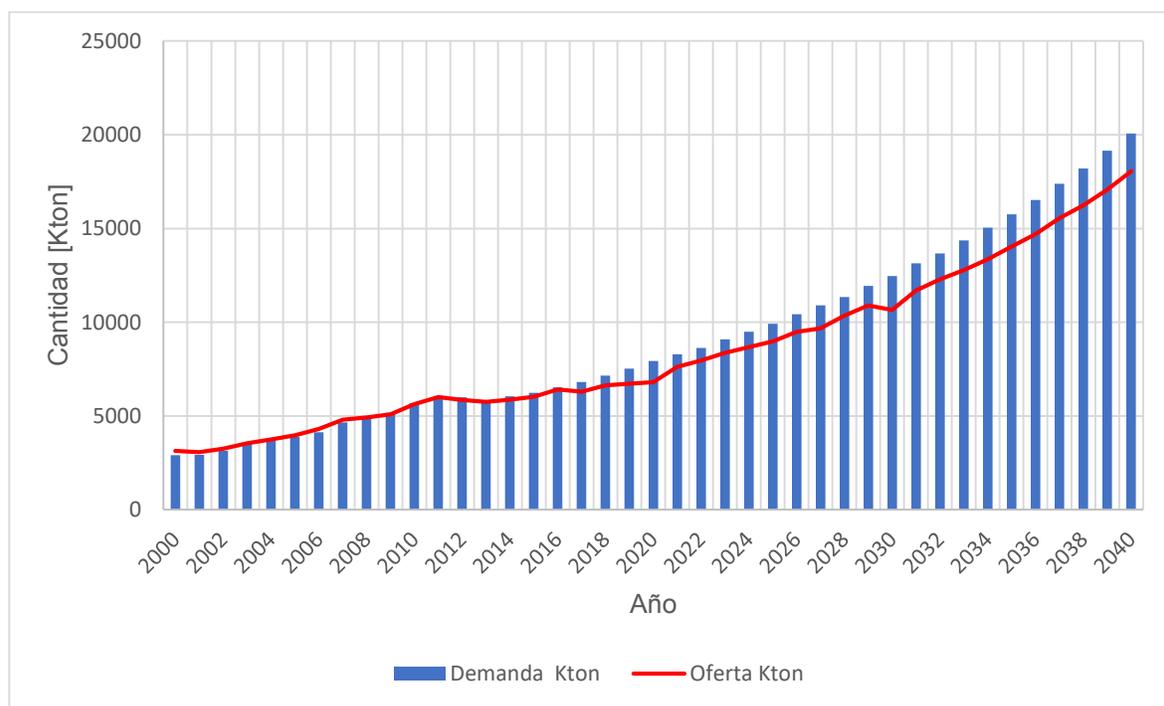
Fuente: Elaboración propia con datos de Jacobs Consultancy Ltd.

La tasa de crecimiento anual en el periodo 2000 a 2014 fue del 0,77% anual. En el periodo 2000 a 2007 la demanda de 1,3 butadieno creció aproximadamente un 3,4% impulsada por la demanda de adiponitrilo y acrilonitrilo-butadieno-estireno. En el 2008 debido a la crisis financiera mundial la demanda de 1,3 butadieno disminuyó un 6,2%, en el 2009 fue del 6,9%

y finalizando la caída en la demanda de 1,3 butadieno en 2010 llegando al 2,5%. La recuperación de mercado se recuperó en 2011 un 2,3%, llegando en 2018 al 1,6% anual.

3.2.3. Asia

Figura 3.4: Oferta y demanda de 1,3 butadieno en Asia.



Fuente: Elaboración propia con datos de Jacobs Consultancy Ltd.

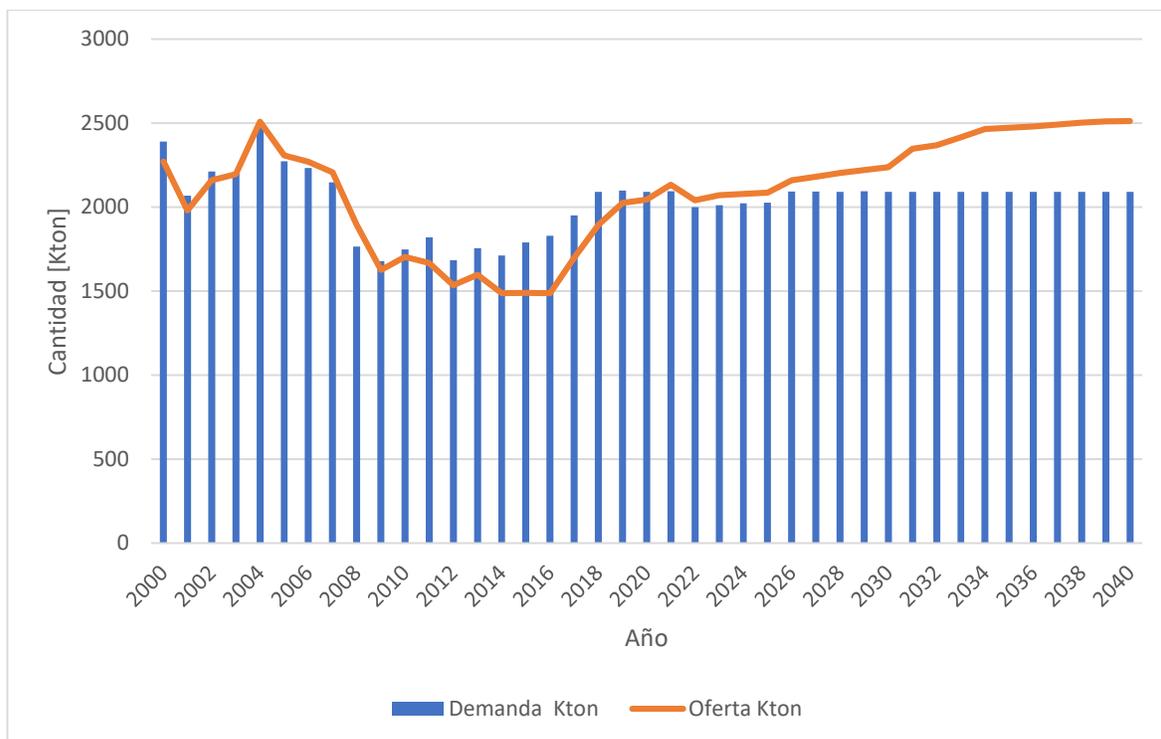
En 2018, la demanda asiática fue de aproximadamente 7.000 [kton], aportando un aproximado del 56% de la demanda global de 1,3 butadieno, la demanda asiática ha crecido de gran manera en los últimos años, no tuvo un gran efecto durante la recesión económica de 2008, teniendo un crecimiento en la demanda del 6,8% y un 4,9% en el 2009. El estímulo que proporciono el gobierno chino y el crecimiento en la demanda en la india, hizo que las tasas de crecimiento de la demanda crecieran un 10,5% en 2010 y un 5,3% en 2011. Después de la contracción de la demanda en 2012 y 2013, la demanda se recuperó en un 2,8% el 2014 y aproximadamente un 4,5% en 2018.

Según la figura 3.4, antes del 2007 Asia era un exportador neto de 1,3 butadieno, a partir de 2008 se convirtió en un importador neto debido a que la demanda aumento considerablemente, China es un importante importador debido a la creciente demanda y se espera que la tendencia continúe en los próximos años.

3.2.4. Norte América

En la Figura 3.5 tenemos la oferta y demanda de 1,3-butadieno en Norte América.

Figura 3.5: Oferta y demanda de 1,3 butadieno en Norte América.



Fuente: Elaboración propia con datos de Jacobs Consultancy Ltd.

En 2018, la demanda en la región norteamericana fue aproximadamente de 2.090 [kton], aportando un 17% a la demanda global de 1,3 butadieno, la demanda en el periodo 2000 y 2014 disminuyó un 2,3% debido a la reducción en la demanda de derivados, la crisis financiera mundial afectó la demanda del mercado, con una disminución del 17,6% en 2008 y 5,3% en 2009 la crisis afectó la tasa de crecimiento de la región.

En los años 2010 a 2014 tuvo tasas de crecimiento positivas a excepción del 2013 donde la demanda anual decreció con la disminución del consumo de SBR. A partir de 2015 hasta el 2018 se evidenció un incremento en la tasa de crecimiento de la demanda por el aumento en la demanda de los productos derivados.

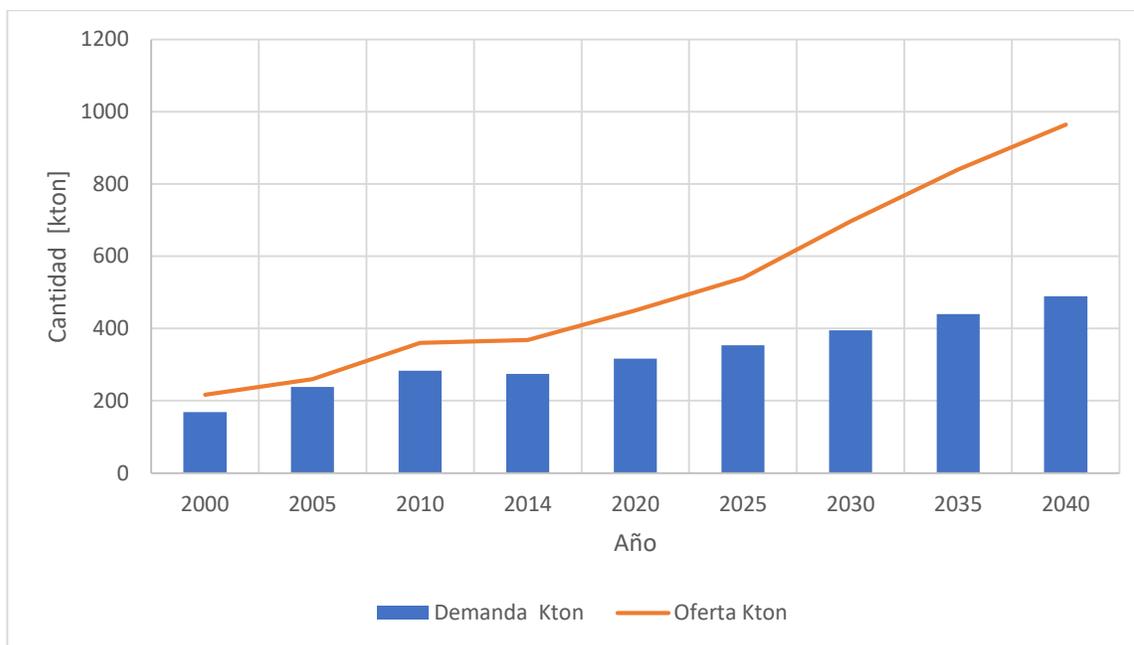
El aumento en la oferta se debe al aumento de las capacidades de producción de aproximadamente 715 [kton] para el 2025, esperando que a partir de 2021 la región

norteamericana cambie la balanza comercial del 1,3 butadieno, pasando de ser región importadora a región exportadora.

3.2.5. Medio oriente y África

En la figura 3.6 tenemos la oferta y demanda en Medio Oriente y África.

Figura 3.6: Oferta y demanda de 1,3 butadieno en Medio Oriente y África.



Fuente: Elaboración propia con datos de Jacobs Consultancy Ltd.

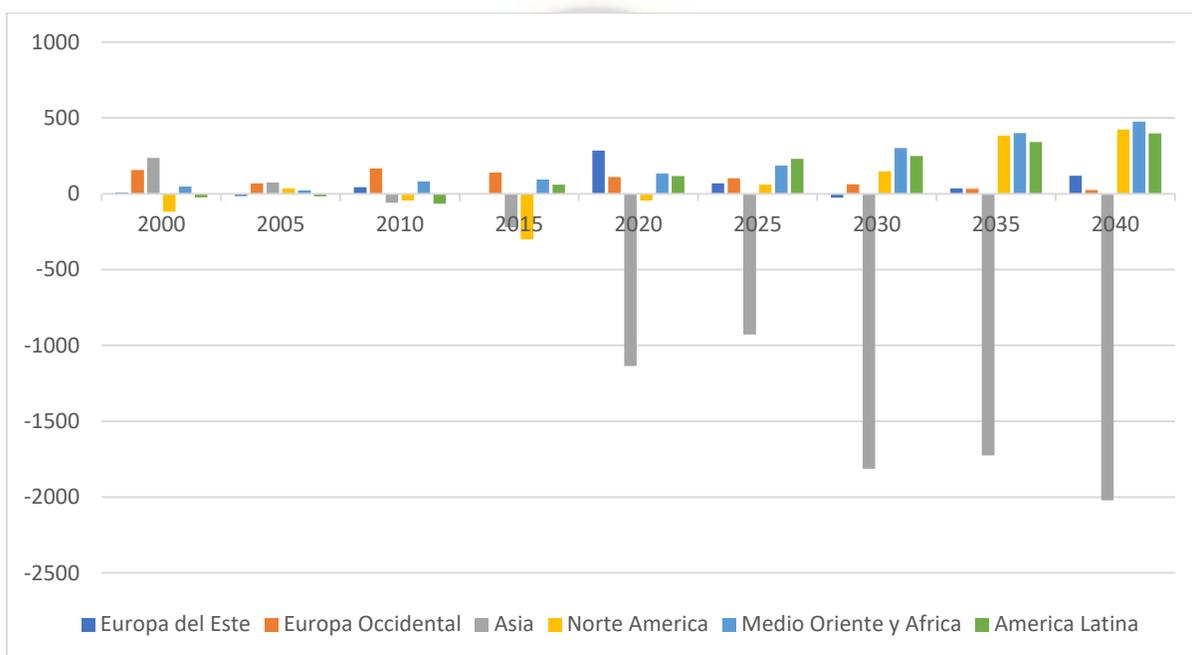
La región de Medio Oriente y África se ha convertido en uno de los mayores proveedores de 1,3 butadieno a nivel mundial, beneficiándose de la materia prima de bajo costo y proximidad a los grandes mercados como Asia y Europa Occidental. La demanda total de 1,3 butadieno en Oriente Medio y África se estimó alrededor de 254,4 [kton], considerando un aumento en la demanda a comparación de 2014 cuando era de 144,5 [kton]. Además, se prevé un crecimiento en la tasa compuesta anual de 2,7%.

3.3. BALANZA COMERCIAL DEL 1,3 BUTADIENO

A nivel mundial la demanda de 1,3 butadieno fue de 12.297 [kton] en 2018, las regiones que abastecieron el mercado con las exportaciones fueron: Europa Occidental, Oriente Medio y África y Latinoamérica, y las regiones importadoras son Asia y Norte América.

Hasta el 2007, Asia era una de las regiones exportadoras de 1,3 butadieno, la región asiática era autosuficiente con la producción, en los últimos años se volvió una región importadora y esto se debe al aumento de la demanda, ante la construcción de nuevas plantas para la producción de 1,3 butadieno que se tuvo en los últimos años. Se estima que la región norteamericana sea autosuficiente con la producción a partir de 2021, dejando de importar y volviéndose una región exportadora de 1,3 butadieno.

Figura 3.7: Balanza comercial del 1,3-butadieno.



Fuente: Elaboración propia con datos de Jacobs Consultancy Ltd.

3.4. DETERMINACIÓN DE LA DEMANDA POTENCIAL INSATISFECHA

El mercado del 1,3 butadieno se puede analizar mediante la demanda insatisfecha que se tiene a nivel mundial, analizaremos la demanda insatisfecha mediante la tabla 3.1, para ver la cantidad anual faltante de este producto petroquímico básico, el cual tiene derivados de los cuales son de consumo potencial a nivel mundial.

La demanda insatisfecha se calculará mediante la ecuación 3.1:

$$DI = D - O \quad (3.1)$$

Donde:

- DI: Demanda Insatisfecha [Kton]
- D: Demanda [Kton]
- O: Oferta [Kton]

En la tabla 3.1, se analizó la demanda insatisfecha por región utilizando la ecuación anterior, mediante la sumatoria se obtuvo la demanda insatisfecha a nivel mundial.

Tabla 3.1: Demanda potencial insatisfecha de 1,3 butadieno.

Año	Europa del Este [kton]	Europa Occidental [kton]	Asia [kton]	Norte América [kton]	Oriente Medio y África [kton]	América Latina [kton]	Total [kton]
2000	-8	-156	-236	117	-48	20	-311
2005	15	-69	-74	-35	-22	18	-167
2010	-44	-165	59	45	-80	67	-118
2015	0	-138	221	300	-94	-55	234
2020	-284	-110	1.136	45	-133	-116	538
2025	-68	-102	930	-60	-186	-229	285
2030	25	-61	1.814	-148	-302	-248	1.080
2035	-35	-32	1.725	-383	-400	-341	534
2040	-119	-26	2.021	-423	-475	-398	580

Fuente: Elaboración propia con datos de Jacobs Consultancy Ltd.

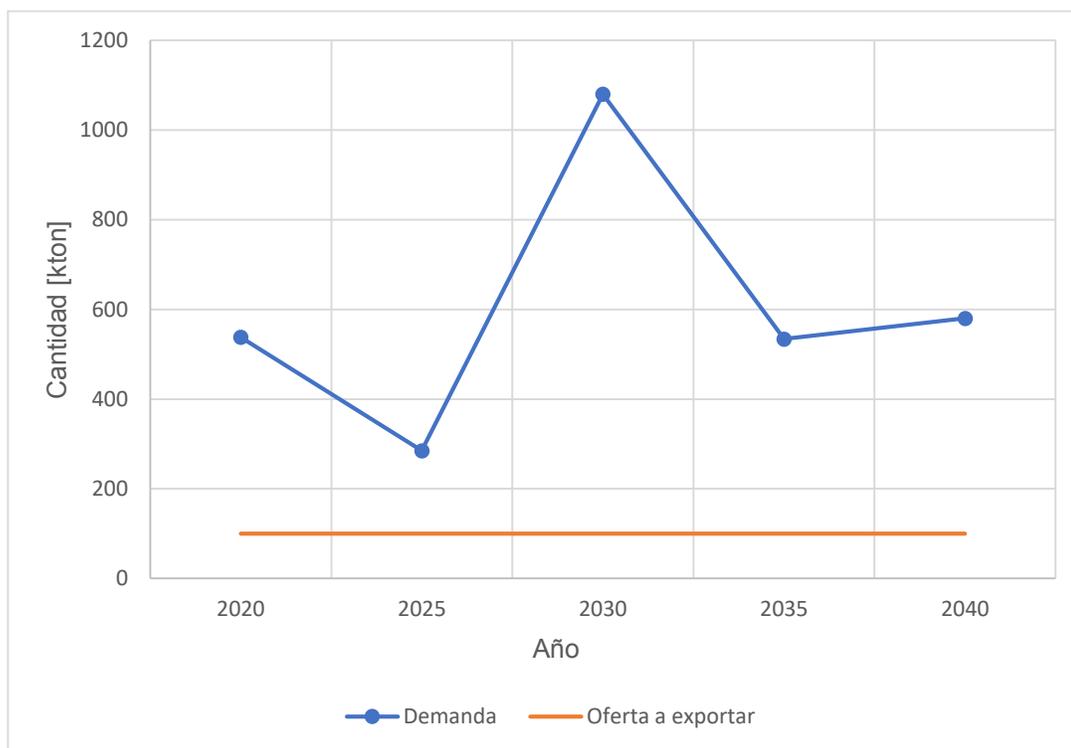
En la tabla 3.1, se analizó la demanda insatisfecha por región utilizando la ecuación 3.1, mediante la sumatoria se obtuvo la demanda insatisfecha a nivel mundial. Se puede observar que a partir del 2015 la demanda insatisfecha aumenta considerablemente ante el considerable aumento de la demanda en la región asiática.

3.5. VOLUMENES DE PRODUCCIÓN PARA EXPORTAR

La producción de 1,3-butadieno será el mayor porcentaje para mercado externo, la exportación al mercado asiático, se producirá 100 [kton] anualmente y se cubrirá el 40% de la demanda del mercado asiático en su inicio.

En la figura 3.10 podemos observar cuanto de la demanda puede satisfacer el implementar una planta de 1,3-butadieno. La cantidad de 1,3-butadieno que se tiene como objetivo exportar puede cambiar de acuerdo a la demanda que se tenga en el mercado asiático, y también el objetivo es ser una competencia en comercializar 1,3-butadieno a países de la región.

Figura 3.8: Exportación de 1,3-butadieno al mercado asiático.



Fuente: Elaboracion propia con datos de Jacobs Consultancy Ltd.

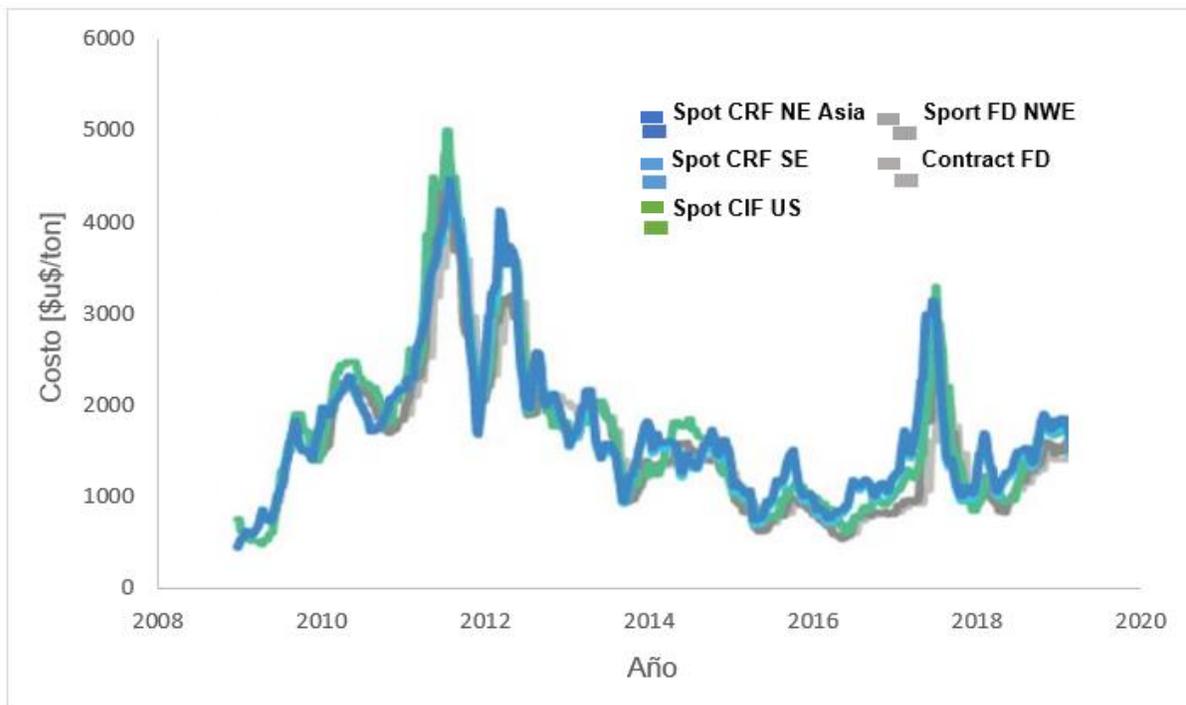
3.6. PRECIO DEL 1,3-BUTADIENO

El 1,3-butadieno desde 2009 fue aumentando el precio en distintos mercados, en la figura 3.8 observamos que llego a un valor máximo entre 2011 – 2012, después de este periodo de su máximo costo el precio del butadieno fue bajando y una de las principales causas fue la guerra comercial existente entre Estados Unidos y China, que afecto la confianza de los consumidores y también la economía global.

En el periodo 2017 – 2018 volvió a aumentar el precio por el crecimiento de la demanda de la región asiática, uno de estos factores importantes es la recuperación en el sector automovilístico que produjo la reapertura de fábricas en China, debido a esto se tuvo un aumento considerable en la demanda de 1,3-butadieno frente a la oferta que se tenía disponible.

El crecimiento económico a inicios del año 2019 fue más débil que el periodo anterior debido a diversos factores políticos, comerciales que afectaron a los países importadores, el crecimiento económico chino impulsara de la demanda del butadieno a nivel mundial.

Figura 3.9: Precio del 1,3-butadieno.



Fuente: I.C.I.S.

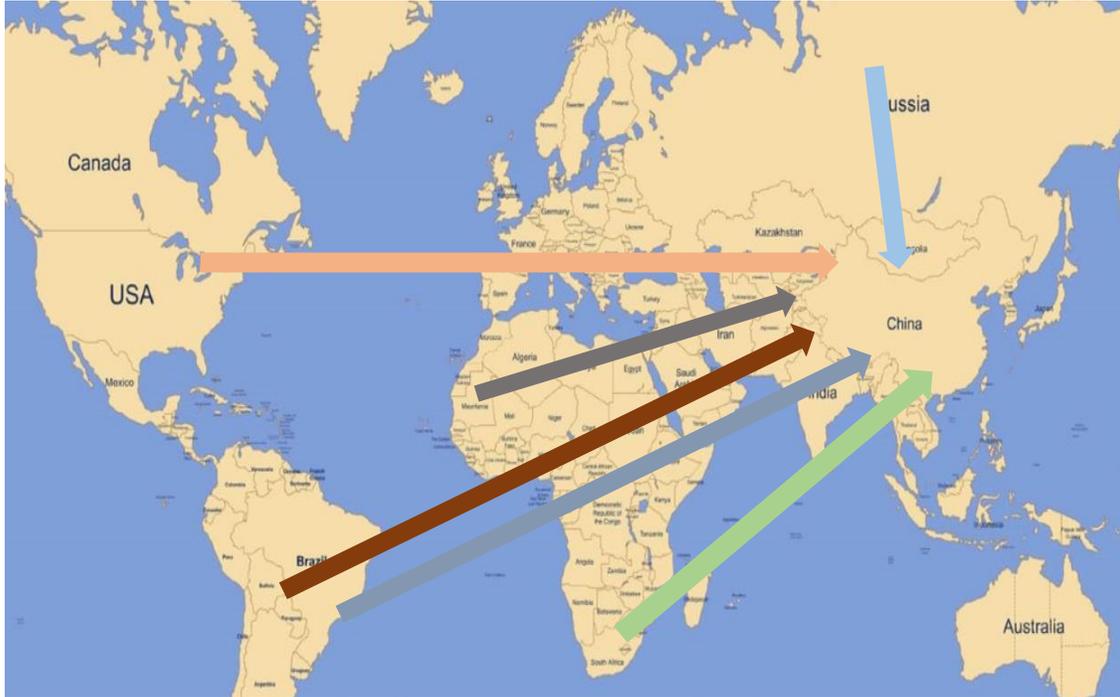
3.7. TARGET PARA LA EXPORTACIÓN DE 1,3-BUTADIENO

En este capítulo analizamos la oferta y demanda de 1,3-butadieno a nivel regional, en el cual tenemos que todas las regiones tienen como objetivo el mercado en la región asiática.

China es uno de los países con mayor industrialización de productos finales de la industria petroquímica, razón por lo cual requiere mayor materia prima, el mercado objetivo para comercializar el 1,3-butadieno que producirémos en nuestro país será la región asiática, se estima en los próximos años un desabastecimiento en este producto ante la gran demanda que se tendrá en los próximos años.

Bolivia es uno de los países que más importa productos de la región asiática, exportar productos petroquímicos básicos al igual que se hace actualmente con los minerales, ayudaría al déficit que se tiene por la relación importación y exportación, según el Instituto Nacional de estadística en 2019 por cada dólar que exportamos, compramos 4 dólares en productos. El objetivo de este mercado para exportar el butadieno de manera estratégica, porque se tiene lazos de hermandad en áreas importantes como el comercio.

Figura 3.10: Target para exportar el 1,3-butadieno.



Fuente: Elaboracion propia en base a diario de cultura.com.ar

La reducción de la producción de 1,3-butadieno redujo en Estados Unidos que debido a la guerra comercial con China y el elevado arancel que colocó China a Estados Unidos, hizo que este redujera la producción de polietileno, es por eso que Estados Unidos es uno de los países importadores de este producto actualmente, lo cual aumentan las posibilidades de que Bolivia exporte este producto a China.

3.8. ANALISIS FODA EN LA PRODUCCION DE 1,3-BUTADIENO

El análisis FODA es importante para realizar la evaluación interna en la implementación de una planta de 1,3-butadieno que son los factores fuertes y débiles, y los factores externos en la evaluación los cuales son las oportunidades y amenazas. (Ponce Talancon, 2006)

En la tabla 3.2 se realizó el análisis FODA para la producción de 1,3-butadieno en nuestro país, este análisis es un instrumento estratégico donde relacionamos las fortalezas y debilidades del proyecto, las amenazas y oportunidades, para tener una visión a futura del proyecto con los aspectos negativos y positivos.

Tabla 3.2: Análisis FODA para la producción de 1,3-butadieno.

Fortalezas	Debilidades
<ul style="list-style-type: none"> • Bolivia es productor de gas rico en componentes para la materia prima en la petroquímica. • Integración en la petroquímica mediante la industrialización de la materia prima. • Disponibilidad del n-butano para producir 1,3-butadieno. • Innovación tecnológica con la implementación de una planta para producir 1,3-butadieno. • Confiabilidad con el mercado asiático. 	<ul style="list-style-type: none"> • Bolivia no tiene puerto marítimo. • Debido a la ley de hidrocarburos las empresas privadas no realizan inversiones en nuestro país. • El bajo incentivo para industrializar los hidrocarburos. • La implementación de plantas petroquímicas con objetivos políticos y no económicos. • Desconfianza de los inversionistas.
Oportunidades	Amenazas
<ul style="list-style-type: none"> • Crecimiento en la demanda de 1,3-butadieno. • Exportación a países en la región asiática, con el objetivo principal el país de China. • Costo por la venta de 1,3-butadieno a la región asiática es competitivo a diferencia de otras regiones. • Crecimiento del mercado petroquímico a nivel mundial. • Posibilidad de expandir la industria petroquímica en Bolivia. 	<ul style="list-style-type: none"> • Competencia de a nivel mundial con Medio Oriente y África, y a nivel regional con Brasil. • Conflictos políticos. • Acuerdos internaciones del mercado objetivo con otros países productores. • Desconfianza del mercado internacional debido a la legislación del país. • Disminución en el precio de los hidrocarburos.

Fuente: Elaboracion propia en base a (Ponce Talancon, 2006).

CAPITULO IV

LOCALIZACIÓN Y TAMAÑO DE LA PLANTA

4.1. LOCALIZACIÓN DE LA PLANTA

La determinación de la localización de la planta de 1,3 butadieno consiste en seguir una serie de pasos desde analizar los factores tecnológicos para la producción, suministro de la materia prima hasta los mercados disponibles para abastecer.

En la localización de la planta de 1,3 butadieno se debe tener una estrategia comercial para llegar a una viabilidad económica del proyecto y ser rentable en la vida productiva de la planta, siendo las decisiones técnicas tomadas para la implementación de esta planta un paso más de los bolivianos a la industrialización de la materia prima.

4.2. FACTORES DE LOCALIZACIÓN

Los factores de localización son muy importantes porque influyen en la decisión de la localización de la planta de 1,3 butadieno, las alternativas de lugares que se tiene para la ubicación depende de estos factores en los cuales se debe evaluar los factores técnicos.

Se tiene un centenar de factores, resumiendo los más importantes tenemos:

- Cercanía de la fuente de materia prima
- Disponibilidad de materia prima
- Medios y costos de transporte
- Vías de comunicación y logística
- Cercanía del mercado
- Disponibilidad de energía eléctrica, agua y otros suministros.
- Factores ambientales
- Costo y disponibilidad de terrenos.
- Topografía de suelos

El análisis para identificar la ubicación adecuada para la planta de 1,3 butadieno es amplio de los cuales detallaremos a continuación los más importantes.

4.2.1. Cercanía de la materia prima

La cercanía de la materia prima es muy importante, porque se refiere a la distancia que se tiene entre la planta de 1,3 Butadieno y el centro de abastecimiento de n-butano. El costo de

abastecimiento es directamente proporcional a la distancia que se tiene del centro de abastecimiento. Es uno de los factores donde se debe minimizar los costos al máximo.

4.2.2. Disponibilidad de materia prima

Bolivia es uno de los países considerados gasíferos por los mega campos que tenemos en la región del sub andino sur, tenemos distintas plantas de procesamiento del gas natural donde se puede obtener el n-butano, el cual es la materia prima para el 1,3 butadieno.

4.2.3. Cercanía del mercado

El análisis del estudio de mercado indica que la región asiática es una de las regiones con mayor demanda de este producto petroquímico básico, debido al crecimiento del consumo para diversas aplicaciones.

Es un aspecto muy importante para localizar la planta tendremos que analizar el transporte no solo por vía terrestre, sino que también se suma a este la vía marítima y los puertos que tenemos a nuestra disposición.

4.2.4. Medios y costos de transporte

Los costos de transporte es un factor relevante para la localización debido que de acuerdo a ello se trazara las rutas para la exportación, porque nuestro producto no será el mercado objetivo en nuestro continente sino tendremos un mercado asiático donde en el trayecto se atravesara la vía marítima.

4.2.5. Disponibilidad de energía eléctrica, agua y otros insumos

La disponibilidad de estos insumos es importante en la localización de la planta.

4.3. LOCALIZACIÓN DE LA PLANTA

4.3.1. Santa Cruz

El municipio de Puerto Suarez se encuentra en la provincia German Bush por su situación fronteriza con el Brasil se convirtió en una pujante ciudad comercial. Cerca de ella se encuentran: Arroyo Concepción, Puerto Quijarro, Puerto Aguirre y la ciudad brasilera Corumbá.

- Acceso económico al Puerto Bush que permite llegar a China.

- Acceso a los países de Uruguay, Paraguay y Argentina por hidrovía. También se tiene transporte ferrocarril y carretero.
- Disponibilidad de agua que ofrece la laguna Cáceres para el proceso correspondiente.

4.3.2. Cochabamba

El municipio de Entre Ríos de la provincia Carrasco del departamento de Cochabamba, ubicado geográficamente al sureste del departamento de Cochabamba, al noreste limita con la provincia Ichilo del departamento de Santa Cruz, al oeste con el municipio de Puerto Villarroel y al sur con el Parque Nacional Carrasco.

- Acceso a carretera- ferrocarril y fluvial.
- Disponibilidad de aguas provenientes del Río Ichilo y otros aledaños.
- Disponibilidad de servicios básicos.
- Cercanía a la frontera con Brasil.

4.3.3. Tarija

El municipio de Yacuiba ubicado en la provincia de Gran Chaco. Se encuentra a una altura media aproximada de 632 msnm., próxima a la Planta Separadora de Líquidos Gran Chaco.

- Cercano a las plantas de procesamientos del Gas Natural.
- Disponibilidad de medios de transporte por carretera y ferrocarril.
- Disponibilidad de agua del río Pilcomayo.
- Disponibilidad de Materia prima.

En la localización adecuada de la planta de 1,3 butadieno, se analizó las posibles zonas donde se puede ubicar esta planta y los factores de localización más influyentes, para ubicar en un lugar óptimo, utilizaremos el método cualitativo por puntos.

4.3.4. Método cualitativo por puntos

Este método, como su nombre lo indica, permite asignar valores cuantitativos a variables subjetivas, por lo que pudiera complementarse con métodos basados exclusivamente en factores económicos u objetivos. El método cualitativo por puntos consiste en definir los principales factores determinantes de una localización para asignarles valores ponderados de peso relativo de acuerdo a la importancia que lo atribuye. (Sapag Chain , Sapag Chain, & Sapag Puelma, 2008)

Tabla 4.1: Análisis de la ubicación de la planta por el método cualitativo por puntos.

Factor	Peso	Santa Cruz		Cochabamba		Tarija	
		C	P	C	P	C	P
Materia prima disponible.	0,3	5	1,5	5	1,5	10	3
Proximidad mercado Asiático.	0,2	6	1,2	7	1,4	5	1
Costo de Insumos.	0,1	7	0,7		0		0
Proximidad Marítima.	0,1	5	0,5	6	0,6	5	0,5
Electricidad.	0,1	7	0,7	7	0,7	7	0,7
Fuente de Agua.	0,1	8	0,8	8	0,8	8	0,8
Proximidad a la fuente de materia prima.	0,1	7	0,7	8	0,8	10	1
Total	1		6,1		5,8		7

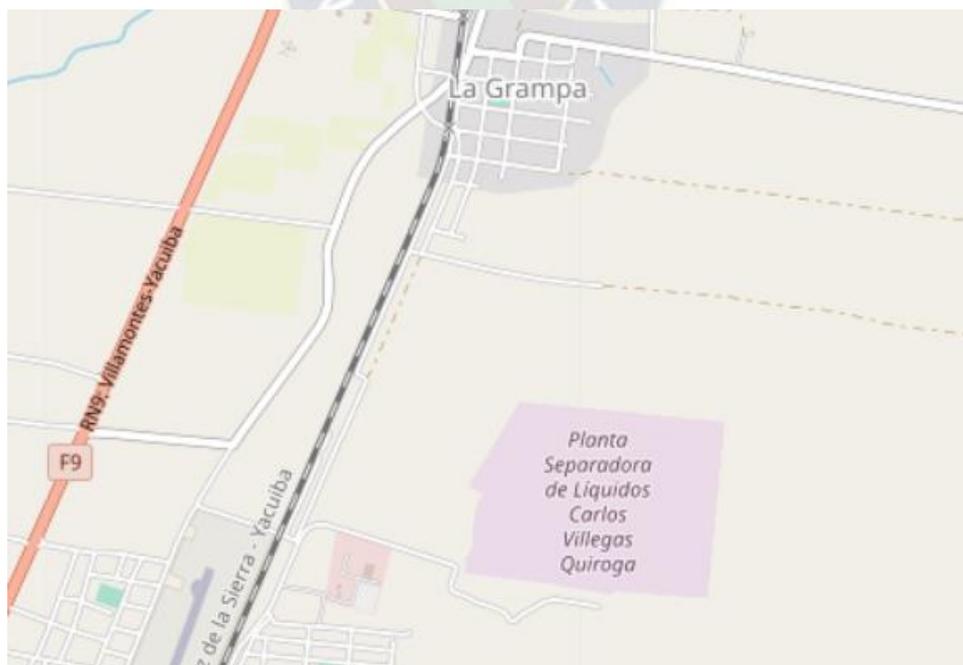
** P (peso).

*. C (calificación).

Fuente: Elaboración propia en base a (Sapag Chain , Sapag Chain, & Sapag Puelma, 2008)

En la tabla 4.1 que se elaboró mediante el método cualitativo por puntos, considerando el análisis de todos los factores de localización, el lugar más favorable para la localización para la planta de 1,3 butadieno es la provincia de Gran Chaco, Tarija.

Figura 4.1: Ubicación de la Planta de 1,3-butadieno.



Fuente: Extraído de es.db-city.com

La planta para la producción de 1,3-butadieno se ubicará en Yacuiba, próximo a la planta separadora de Líquidos Gran Chaco, con el objetivo principal del abastecimiento de la materia prima, la cual es el n-butano.

4.4. TAMAÑO DE LA PLANTA

4.4.1. Factores que condicionan el tamaño del proyecto

Son los principales factores que condicionan e inciden en el tamaño del proyecto.

- Capacidad del mercado consumidor
- Capacidad del mercado para proveer materias primas e insumos.
- Existencia del mercado proveedor de maquinaria y equipos.
- Financiamiento para la instalación de la planta.

4.5. DISPONIBILIDAD DE INSUMOS

La planta de separación de líquidos Gran Chaco se encuentra en el municipio de Yacuiba, dentro de la provincia Gran Chaco en el departamento de Tarija.

Para la obtención del 1,3 butadieno la materia prima requerida es el n-butano, misma que se tomara de la planta separadora de líquidos Gran Chaco. (Hernandez & Jimenez , 2014)

Tabla 4.2: Cromatografía del GLP.

Componente	Composición molar	Peso Molecular
Etano	0,0015	30
Propano	0,6894	44
Iso butano	0,1263	58
Normal butano	0,1686	58
Iso pentano	0,0121	72
Normal pentano	0,0021	72

Fuente: YPFB

Determinación de la máxima cantidad de materia prima.

Calculo del peso molecular con la ecuación 4.1.

$$M_{GLP} = \sum x_i * M_i \quad (4.1)$$

Donde:

- M_{GLP} : Peso molecular del GLP en $\left[\frac{\text{lb}}{\text{lb} \cdot \text{mol}}\right]$.
- x_i : Fracción molar del componente i.
- M_i : Peso molecular del componente i $\left[\frac{\text{lb}}{\text{lb} \cdot \text{mol}}\right]$.

Reemplazando datos en la ecuación 4.1.

$$M_{GLP} = (0,0015 * 30 + 0,6894 * 44 + 0,1263 * 58 + 0,1686 * 58 + 0,0121 * 72 + 0,0021 * 72) \left[\frac{\text{lb}}{\text{lb} \cdot \text{mol}}\right]$$

$$M_{GLP} = 48,612 \left[\frac{\text{lb}}{\text{lb} \cdot \text{mol}}\right]$$

La cantidad de GLP en flujo molar será:

$$\text{Cantidad}_{GLP} = 2.247 \left[\frac{\text{TM}}{\text{d}}\right] * \frac{1.000[\text{Kg}]}{1 [\text{TM}]} * \frac{1 [\text{lb}]}{0.4536[\text{Kg}]} * \frac{1 [\text{lb} \cdot \text{mol}]}{48.612[\text{lb}]}$$

$$\text{Cantidad}_{GLP} = 101.902,899 \left[\frac{\text{lb} \cdot \text{mol}}{\text{d}}\right]$$

De los cuales el 27% de la capacidad se encuentra abasteciendo el mercado interno como el mercado de exportación.

Entonces el excedente es el restante 73% de la capacidad.

$$\text{Cantidad}_{GLP} = 101.902,899 \left[\frac{\text{lb} \cdot \text{mol}}{\text{d}}\right] * \frac{73\%}{100\%}$$

Este excedente se puede destinar como la materia prima para la planta que estamos evaluando, entonces la cantidad de materia prima disponible será:

$$\text{Cantidad}_{N\text{-butano}} = 74.389,116 \left[\frac{\text{lb} \cdot \text{mol GLP}}{\text{d}}\right] * \frac{16,86 [\text{n-butano}]}{100 [\text{lb} \cdot \text{mol GLP}]}$$

$$\text{Cantidad}_{N\text{-butano}} = 12.542,005 \left[\frac{\text{lb} \cdot \text{mol}}{\text{d}}\right] * \frac{58,12[\text{lb}]}{1[\text{lb} \cdot \text{mol}]} * \frac{0,4536[\text{kg}]}{1[\text{lb}]} * \frac{1 [\text{TM}]}{1.000[\text{kg}]}$$

$$\text{Cantidad}_{N\text{-butano}} = 330,648 \left[\frac{\text{TM}}{\text{d}}\right]$$

Se tendrá 330,648 [TMD] de n-butano como materia prima disponible para la producción de 1,3-butadieno, lo cual es beneficioso para el país ante la capacidad de producción de n-butano en las plantas de separación de líquidos.

4.6. TAMAÑO Y MERCADO

Es muy importante analizar la demanda insatisfecha en el periodo de 20 años, la demanda insatisfecha del producto es la cantidad determinada y se pueden especificar, es muy importante la inversión justificando los costos de producción para tener una rentabilidad en la planta. (Desarrollo, 1973)

Demanda insatisfecha proyectada se tiene en la tabla 4.2.

Tabla 4.3: Demanda insatisfecha proyectada hasta 2040.

Año	Demanda Insatisfecha Total [kton]	Oferta del Proyecto [Kton]	% Demanda que cubre el proyecto
2000	-311	-	-
2005	-167	-	-
2010	-118	-	-
2015	234	-	-
2020	538	100	46%
2025	285	100	88%
2030	1.080	100	23%
2035	534	100	47%
2040	580	100	43%

Fuente: Elaboración propia con datos de Jacobs Consultancy Ltd.

En la implementación de la planta de 1,3-butadieno se determinó el tamaño de la planta en función a la materia prima disponible y al mercado objetivo que se realizó en el estudio de mercado, la capacidad de producción será constante según el periodo de tiempo que se volverá a analizar si es viable ampliar la capacidad de producción o mantener constante esta capacidad inicialmente instalada. El mercado asiático generada grandes ingresos al país para seguir invirtiendo en otras plantas petroquímicas y seguir con el desarrollo económico del país.

CAPÍTULO V

INGENIERIA DEL PROYECTO

La ingeniería del proyecto es muy importante debido a que en este capítulo se analizarán criterios para la obtención del 1,3-butadieno mediante el simulador Aspen Hysys v 8.8, describiremos la importancia de cada etapa que tendremos para obtener este producto.

5.1. DESCRIPCIÓN DE LOS PROCESOS PARA PRODUCIR 1,3-BUTADIENO

5.1.1. 1,3-Butadieno de las fracciones de C₄ de craqueo

En los países que se obtiene etileno por la ruptura mediante vapor (steam cracking) de los hidrocarburos de refinería, contienen fracciones de C₄ con una cantidad de butadieno. La fracción C₄ que procede de los craqueos de la nafta puede ser de un 9% en peso del producto del cual es disociado con 45-50% en peso de butadieno. Los países con esta base de materia prima para obtener butadieno se encuentran principalmente Estados Unidos, Europa Occidental y Japón. La tabla siguiente nos indica el contenido de butadieno obtenido en las plantas de etileno por craqueo de diferentes productos de partida. (Weissermel & Arpe, 1981)

Tabla 5.1: Contenido en butadieno en porcentaje.

Producto empleado	Contenido de butadieno en %
Etano	1 - 2
Propano	4 - 7
n-butano	7 - 11
Nafta	12 - 15
Gasoil	18 - 24

Fuente: (Weissermel & Arpe, 1981)

La mezcla de C₄ está constituido por: n-butano, 1-buteno, 2-buteno, i-buteno y 1,3-butadieno, se originan como subproductos en las plantas de craqueo, en la tabla anterior se evidencio los rendimientos de acuerdo a la alimentación en la planta de craqueo. (Monco Martinez, 1990)

En la mezcla de craqueo se separan las distintas olefinas: etileno, propileno y la fracción de C₄, que contiene principalmente el 1,3-butadieno, isobutileno y 1-buteno, estos alquenos son materias primas para la fabricación de plásticos, caucho, alcoholes, aldeidos entre otras aplicaciones para los productos finales. (Primo Yurifera, 1996)

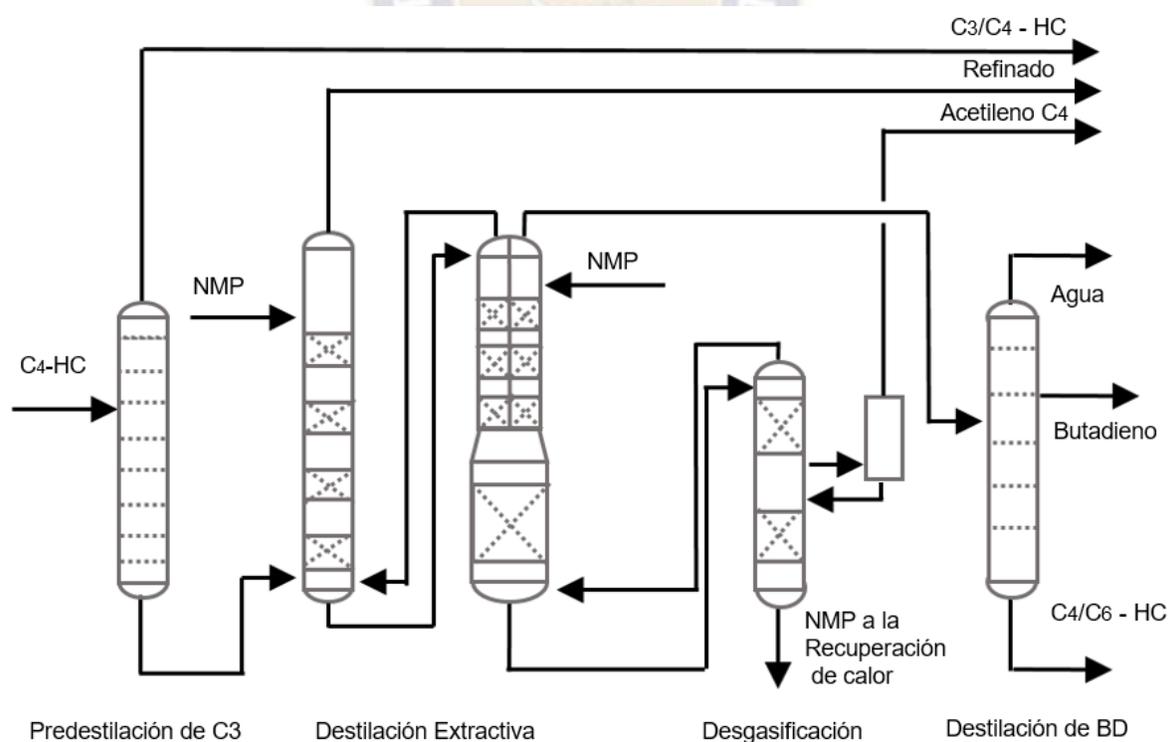
La recuperación de 1,3-butadieno crudo de una fracción de C4 es un problema de destilación muy complicado debido a las pequeñas diferencias de volatilidad relativa de los componentes de la fracción de C4. Entonces se recupera el butadieno mediante la destilación extractiva, es decir, con la adición de un solvente o extractante que tiene un punto de ebullición superior a la mezcla de C4, aumentando la diferencia de punto de ebullición de los componentes a separar. (United States Patente nº 7226527, 2007)

Tabla 5.2: Temperatura de ebullición de las fracciones de C₄.

Compuesto	Temperatura de ebullición [°C]
i-buteno	-6,90
1-buteno	-6,26
trans-2-buteno	0,88
Cis-2-buteno	3,72
1,3-butadieno	-4,41

Fuente: Elaboración propia en base a (Weissermel & Arpe, 1981).

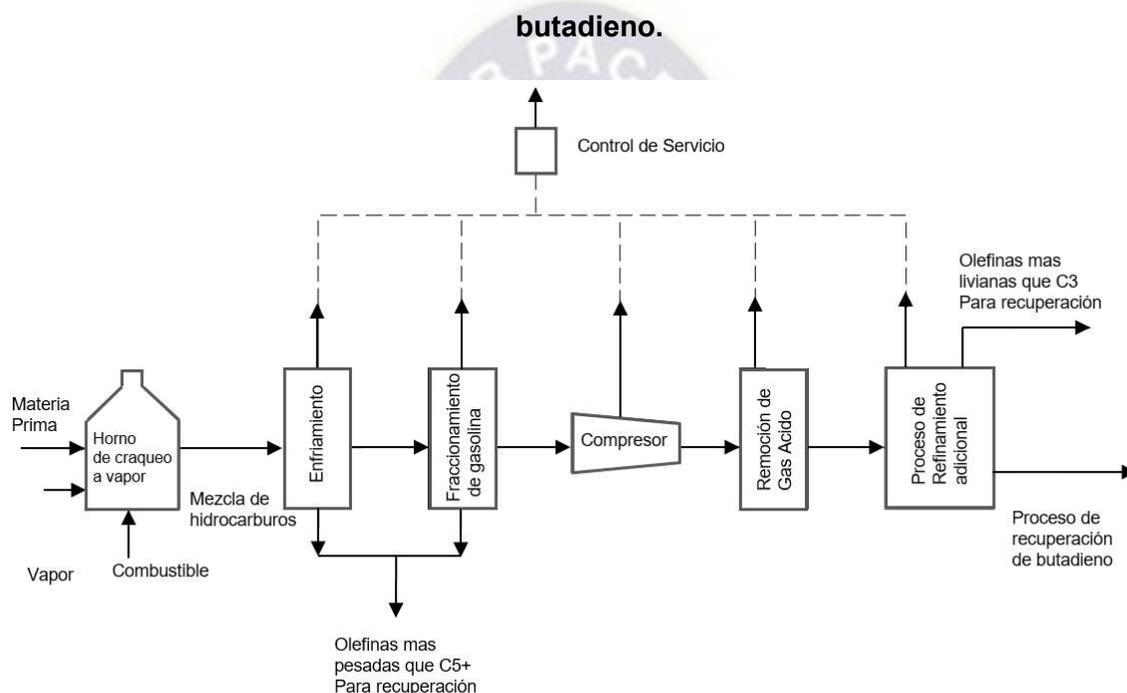
Figura 5.1: Diagrama del proceso para la recuperación de 1,3-butadieno de una corriente de C₄.



Fuente: (Domenico D'Elia, 2018)

En la recuperación de 1.3-butadieno según la licencia NMP de BASF, se tiene una torre de predestilación donde se separa el acetileno de metilo, propadieno y otros componentes livianos de la fracción de C4 que entonces entra a la sección inferior de la columna de lavado principal, mientras que el NMP entra a la sección superior. El refinado de C4 consiste en una mezcla de butanos y butenos que se extrae como producto de tope, el solvente es enviado al rectificador. En el primer compartimiento se tiene los butenos enviados a reciclo y en el segundo compartimiento se obtiene el butadieno crudo. (Domenico D'Elia, 2018)

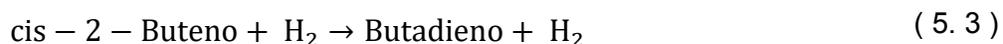
Figura 5.2: Diagrama del proceso de la producción de una corriente de C₄ con butadieno.



Fuente: (Kuhn & Wassel, 1986)

5.1.2. Deshidrogenación de butanos y butenos

Las reacciones de deshidrogenación son endotérmicas, siendo válidos los siguientes valores a 430 °C:



Según el principio de Le Chatelier, el rendimiento aumenta al disminuir la presión parcial de los productos de reacción. Prácticamente, la deshidrogenación puede mejorarse llevando a

cabo la reacción al vacío o mediante la adición de vapor. Este último tiene las siguientes ventajas:

- Reduce la coquización del catalizador de deshidrogenación.
- Proporciona el calor requerido para el proceso de deshidrogenación endotérmica.
- El vapor se puede separar fácilmente de los productos de reacción por condensación.
- Se consigue un aumento adicional en el rendimiento elevando la temperatura de reacción.

Las reacciones secundarias indeseables son craqueo, isomerización y polimerización. Los compuestos que tienden a sufrir estas reacciones se eliminan antes del proceso de deshidrogenación. (Grub & Loser, 2012)

5.1.2.1. Deshidrogenación de n-butano

La deshidrogenación en un solo paso más conocida es el proceso de Houdry Catadiene, que ha estado en funcionamiento a escala comercial desde 1943. En este proceso adiabático, varios reactores de lecho empaquetado, dispuestos paralelos entre sí, funcionan alternativamente. El óxido de aluminio mezclado con aproximadamente 20% de óxido de cromo es el catalizador.

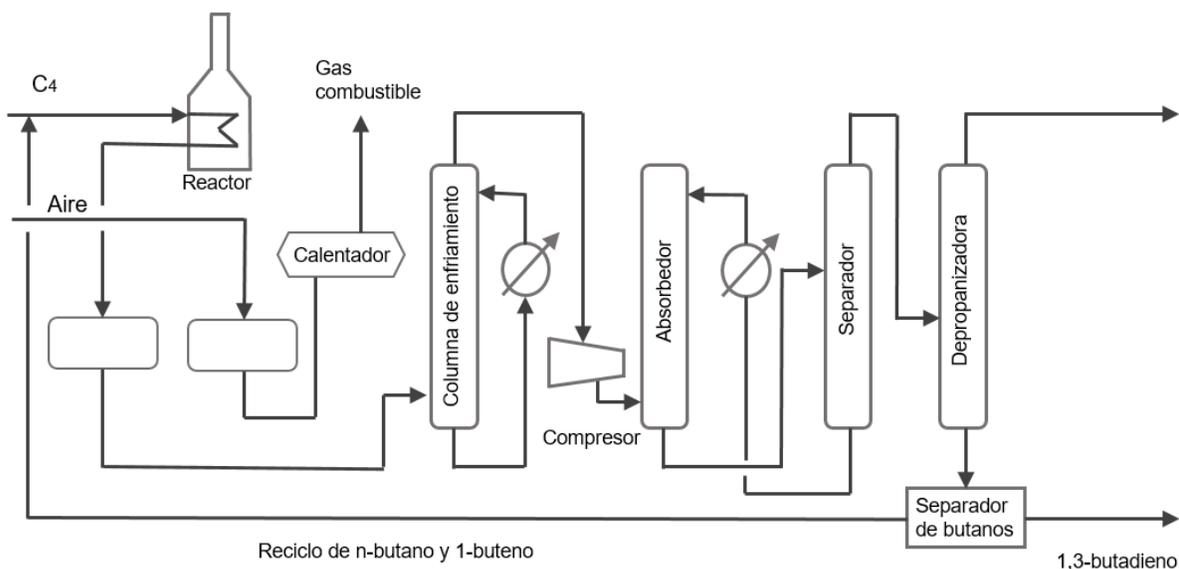
El n-butano se somete a deshidrogenación como tal o en una mezcla de n-butenos a 600 - 700 [°C] y 10 - 25 [kPa]. El uso de altas temperaturas produce subproductos como hidrocarburos C1 - C3, hidrógeno y depósitos de carbono en el catalizador. Después de 5 a 15 minutos de tiempo de funcionamiento, el reactor cambia a regeneración.

Phillips Petroleum ha desarrollado un proceso de deshidrogenación de dos pasos:

- El n-butano se deshidrogena catalíticamente a buteno a 600 [°C] y 1 [bar] en $\text{Cr}_2\text{O}_3 - \text{Na}_2\text{O} - \text{Al}_2\text{O}_3$.
- Los n-butenos se separan por destilación extractiva con auxiliares como acetona, acetonitrilo y furfural.
- Los n-butenos se deshidrogenan a butadieno en un reactor tubular isotérmico, se calientan con gas de combustión a 600 [°C], a una presión de 1 [bar], con la adición de vapor sobrecalentado en un catalizador de $\text{Fe}_2\text{O}_3 - \text{K}_2\text{O} - \text{Al}_2\text{O}_3$.
- El butadieno se recupera por destilación extractiva con los auxiliares mencionados anteriormente y se purifica.

Las ventajas de este método son los tiempos de funcionamiento más largos sin regeneración del catalizador y mayores rendimientos de butadieno (65% basado en butano).

Figura 5.3: Proceso de Houdry Catadiene.



Fuente: (Grub & Loser, 2012)

5.1.2.2. Deshidrogenación de n-butenos.

Los n-butenos se forman en la producción de gasolina estándar por craqueo catalítico, en la producción de olefinas por craqueo térmico y en la deshidrogenación de GLP. Normalmente, los butenos son parte de una mezcla de hidrocarburos C4. Las parafinas C4 se pueden separar de las olefinas C4 por destilación extractiva, como se emplea habitualmente en la recuperación de butadieno.

Tabla 5.3: Deshidrogenación catalítica de butenos.

Catalizador	Phillips 1490	Shell 205	Dow Type B
Composición.	$\text{Fe}_2\text{O}_3 \rightarrow \text{Bauxite}$	$\text{Fe}_2\text{O}_3 \rightarrow \text{Cr}_2\text{O}_3$	Ca/Na fosfato – Cr_2O_3
Relación molar H ₂ O / buteno.	9 – 12/1	8/1	18 – 20/1
Conversión [%].	26 – 28	27 - 33	<45
Selectividad.	76	70	90
Regeneración.	-	24 h	30 min
Duración de la regeneración.	-	1 h	15 min

Fuente: (Grub & Loser, 2012)

Los puntos de ebullición del iso-buteno y el n-buteno están tan juntos que solo pueden separarse por métodos especiales. El proceso BASF en fase gaseosa emplea 40-45% de H₂SO₄ para convertir selectivamente isobuteno en terc-butanol.

5.1.3. Deshidrogenación oxidativa de n-butano y n-buteno

5.1.3.1. Deshidrogenación oxidativa de n-butano

La deshidrogenación oxidativa de alcanos tiene un alto potencial para sobrellevar las limitaciones termodinámicas de la deshidrogenación pura, operando a bajas temperaturas con una reacción exotérmica y menores ciclos de regeneración del catalizador. (Díaz Velásquez, Rodríguez, & Carballo, 2001)

La deshidrogenación oxidativa del n-butano para obtener productos principales el 1,3-butadieno y butenos se lleva a cabo con temperaturas no elevadas, este método de obtención como producto principal el 1,3-butadieno mayor grado de deshidrogenación que en el método de deshidrogenación no oxidativa pero el rendimiento está limitado por las reacciones secundarias que se tiene por tener más carbonos secundarios que el etanol y propano. (Armas Marín, 2004)

El butano en fase gaseosa en presencia de óxido de cromo y aluminio, a presión atmosférica y una temperatura de 750 [°C] en un reactor de lecho fijo puede producir butadieno, este método de producción de 1,3-butadieno presenta ventajas sobre la deshidrogenación térmica, debido a que permite obtener directamente butenos y butadieno sin las limitaciones termodinámicas del equilibrio de deshidrogenación, y sin la necesidad de aporte externo de calor al proceso, pero en desventaja se pierde la selectividad con la formación de dióxido de carbono. (Santamaría, Herguido, Menéndez, & Monzón, 1999)

5.1.3.2. Deshidrogenación oxidativa de n-butenos

La conversión y la selectividad de la deshidrogenación de n-butenos a butadieno pueden mejorarse significativamente eliminando el hidrógeno del equilibrio. La adición de oxígeno provoca la oxidación del hidrógeno en agua:



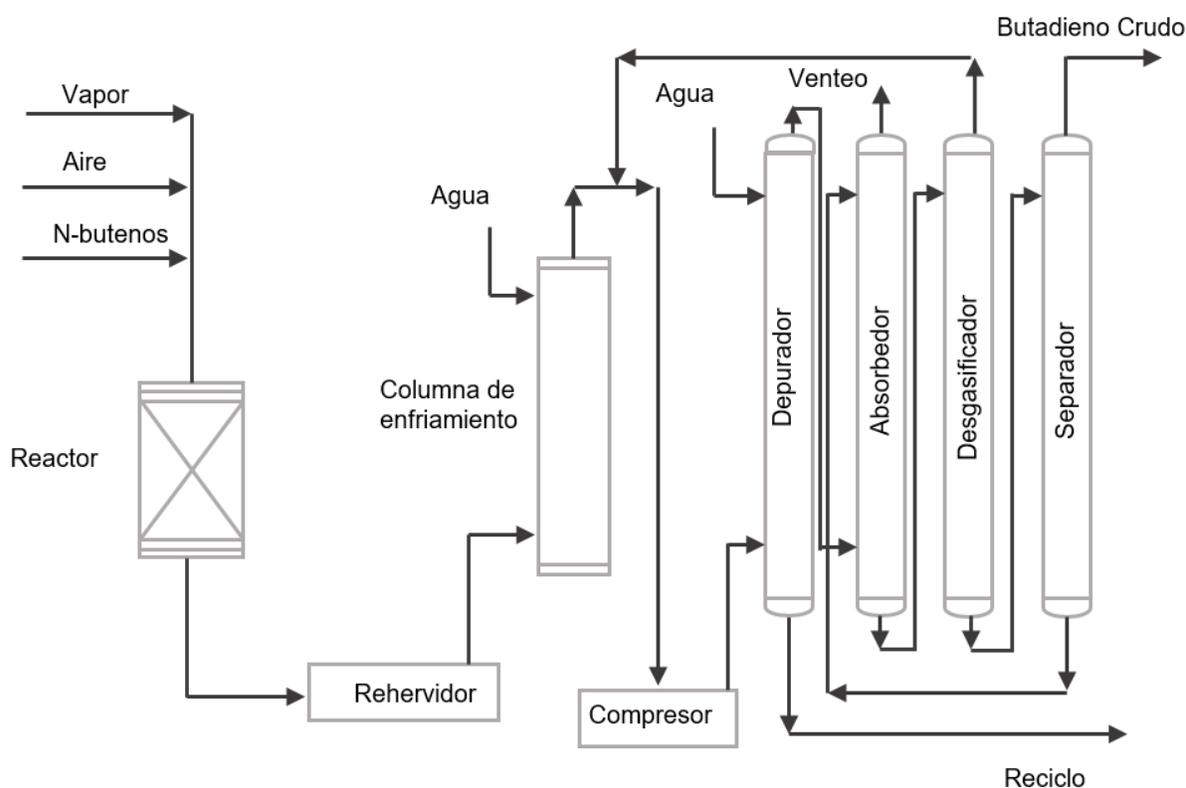
Esta reacción no es afectada por el equilibrio termodinámico, el hidrógeno generado se elimina de la reacción mediante la formación de agua. (Toledo Antonio, 1998)

Los métodos especialmente productivos son el proceso Oxo-D de Petro-Tex y el proceso O-X-D de Phillips. El proceso Oxo-D se aplicó por primera vez a gran escala en 1965. Petro-Tex logró una conversión del 65% y una selectividad de butadieno del 93% mediante el uso de una relación molar vapor / buteno de 12/1. Phillips también obtuvo una alta conversión y una selectividad de butadieno del 88 al 92%.

La oxidación exotérmica del hidrógeno cubre parcialmente los requerimientos de calor de la reacción de deshidrogenación endotérmica y, además, el oxígeno junto con el vapor agregado durante la reacción, conduce a una disminución de la coquización del catalizador, además el vapor disipa el calor.

El proceso de deshidrogenación oxidativa opera a bajas presiones y elevadas temperaturas (500-600 [°C]), donde sus rendimiento se encuentran en el rango de 70 a 90%, con una relación mola de oxígeno a n-buteno de 0.55. (American' Chemistry Council, 2019)

Figura 5.4: Proceso Oxo-D.



Fuente: (American' Chemistry Council, 2019)

5.2. SELECCIÓN DEL PROCESO

En la selección del proceso, en primera instancia se realizó una comparación entre procesos comerciales para la producción de 1,3 butadieno descrito en el capítulo correspondiente del presente proyecto, del cual se analizó las ventajas y desventajas que ofrece cada uno de estos procesos en la tabla 5.4, donde se menciona todas las ventajas y desventajas de cada proceso.

Tabla 5.4: Ventajas y desventajas de los procesos para la producción de 1,3-butadieno.

Proceso	Ventajas	Desventajas
Craqueo al vapor de hidrocarburos parafínicos	El 91% de la producción mundial de 1,3 butadieno se produce de esta manera.	El 1,3 butadieno no es un producto principal y su producción están en función a la producción de etileno.
Deshidrogenación catalítica de n-butano y n-buteno Houdry Catadiene	Mayor tiempo de funcionamiento sin regeneración del catalizador.	Bajos rendimientos en la obtención de 1,3 butadieno.
Deshidrogenación oxidativa del n-buteno y n-butano Oxo-d o O-X-D	Bajo consumo de vapor. Alta conversión y selectividad al 1,3 butadieno. Mayor vida útil del catalizador. El catalizador se regenera automáticamente (no requiere regeneración por separado).	El hidrogeno en el equilibrio reduce la conversión y la selectividad.
Etanol a butadieno	Para plantas de menor capacidad son viables.	Actualmente no se tiene producción industrial a partir de esta materia prima. El más costoso que las rutas del n-butano y n-buteno. No es competitivo para producir grandes volúmenes.

Fuente: Elaboración propia en base a (American' Chemistry Council, 2019).

Con la implementación del proceso O-X-D, tenemos ventajas importantes en la producción de 1,3-butadieno como es la alta conversión y elevada selectividad en el proceso.

Otros aspectos que se debe considerar son la materia prima requerida en cada proceso, las condiciones de operación y algunas características importantes, las cuales se mencionan en la tabla 5.5.

Tabla 5.5: Procesos de obtención de 1,3 butadieno.

Proceso	Materia Prima	Condiciones de Operación	Características Principales
Craqueo al vapor de hidrocarburos parafinicos	Nafta Gas Oil Etano Propano Butano	790 - 830 [°C]	Se alimenta a un horno de pirolisis (craqueo vapor). Debido a estas condiciones de temperatura se produce la rotura de enlaces C- C.
Deshidrogenacion catalítica de n-butano y n-buteno Houndry Catadiene	n-butano n-buteno	10- 25 [kPa] 600 - 700 [°C]	Se utiliza catalizadores cromo/alúmina. Se utiliza tres o más reactores. Tiempo aproximado de residencia de la alimentación en el reactor es de 5 - 15 min. Se tiene reacciones endotérmicas.
Deshidrogenacion oxidativa del n-buteno Oxo-d o O-X-D	n-butano n-buteno	400 - 600 [°C] 0.2 - 2 [atm]	El catalizador es una mezcla de molibdato y fosfato de bismuto, dopado con metales de transición. Los rendimientos y la selectividad de la reacción oscilan entre el 70 y 90%. La relación molar oxígeno / buteno es aproximadamente 0,55.
Etanol a butadieno	Etanol	325-350 [°C]	Se utiliza catalizador de sílice porosa promovida por el tántalo.

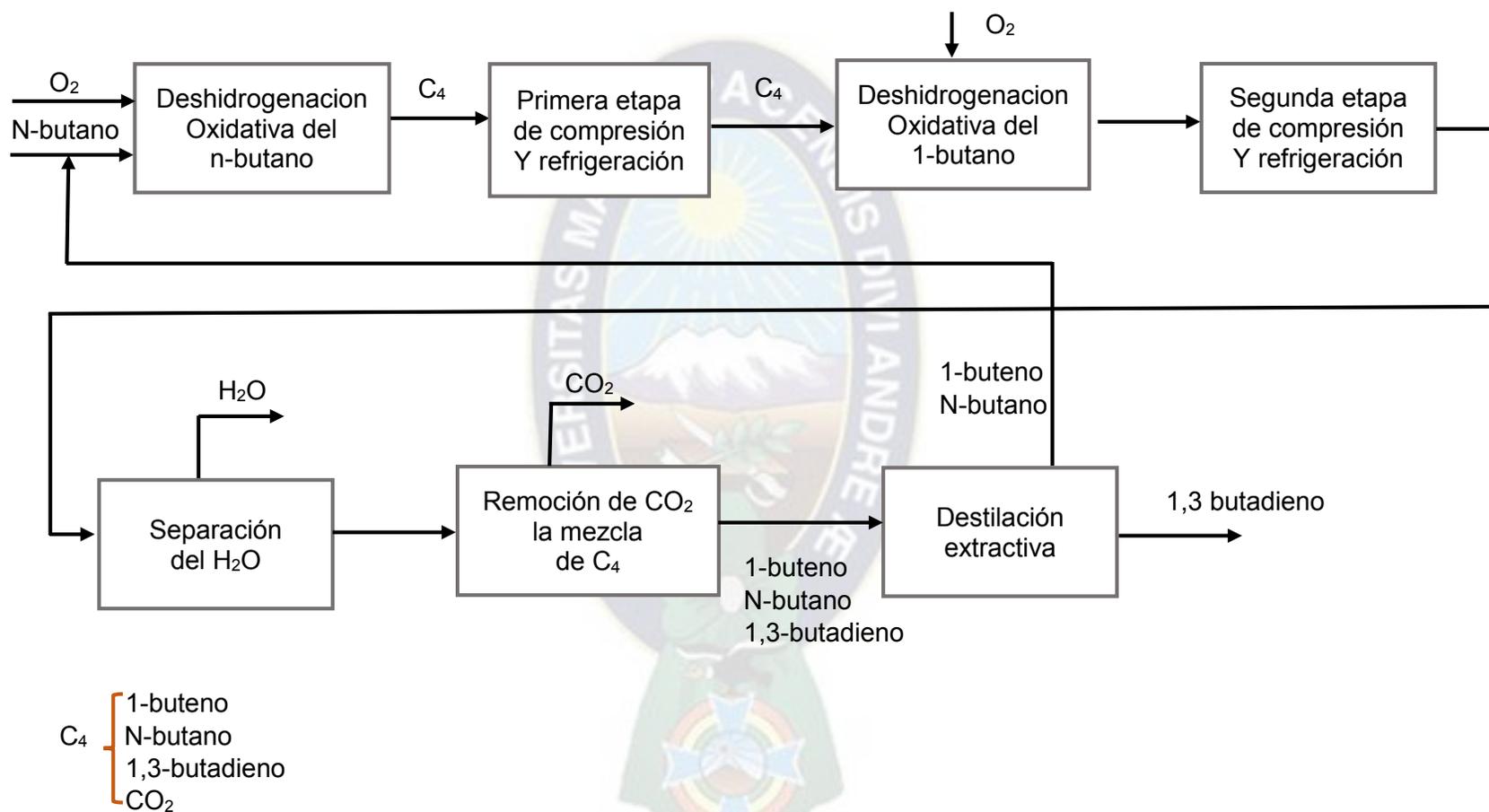
Fuente: Elaboración propia en base a (Armas Marin, 2004).

El proceso a seleccionar será el O-X-D, porque nos ofrece mayores rendimientos, mayor selectividad a 1,3-butadieno a diferencia de los demás procesos, no es producto secundario y tampoco tiene bajos rendimientos.

5.3. DESCRIPCIÓN DEL PROCESO O-X-D

El proceso O-X-O para producir comercialmente 1,3-butadieno, se desarrolló varios procesos y sistemas catalíticos para la deshidrogenacion oxidativa del n-butano y n-buteno, en la figura 5.5 podemos observar el diagrama de flujo del proceso O-X-D para obtener 1,3-butadieno.

Figura 5.5: Diagrama de flujo en el proceso de obtención de 1,3-butadieno con el proceso O-X-D.



Fuente: Elaboración propia con la base de la patente.

En la primera etapa las corrientes que contienen n-butano y oxígeno, se alimentan al reactor tubular de lecho fijo donde se obtiene como productos n-butano, 1-buteno, 1,3-butadieno, dióxido de carbono y agua, esta corriente proveniente del primer reactor se encuentra a elevadas temperaturas y pasa a la primera zona de refrigeración y compresión para alimentar a las condiciones óptimas para ingresar al segundo reactor tubular de lecho fijo, donde el objetivo principal de este reactor es la conversión del 1-buteno a 1,3-butadieno, esta alimentación pasa a la segunda de refrigeración y compresión para la condiciones óptimas a la siguiente etapa del proceso.

En la segunda etapa se reduce la cantidad de dióxido de carbono mediante una columna de absorción en contracorriente con DEA, se obtiene una corriente de gas dulce con la mínima cantidad de dióxido de carbono para cumplir especificaciones de venta.

En la tercera etapa se recupera el 1,3-butadieno, la recuperación se realiza con una técnica especial denominada "Destilación Extractiva", debido a que se tiene una estrecha diferencia de puntos de ebullición entre el n-butano, 1-buteno y 1,3-butadieno, esta mezcla se alimenta a una columna de destilación extractiva en contracorriente corriente con el solvente seleccionado, este solvente extrae de la mezcla el 1,3-butadieno y sale como producto de fondo, esta alimentación pasa a una nueva columna para recuperar el solvente, el producto de cima es el 1,3-butadieno con porcentajes de arrastre de n-butano y 1-buteno, en la corriente de fondo se obtiene el solvente, el objetivo de la segunda columna es para recuperar el solvente para que recircule en todo este proceso.

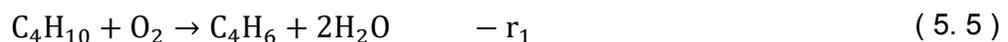
5.4. Cinética química

La cinética química estudia la velocidad a la que ocurre la reacción química, los factores más importantes son la velocidad de reacción y el mecanismo de reacción. (Coulson & Richardson, 1984)

5.4.1. La velocidad de reacción

Durante la evolución de la reacción química, cantidad de cada especie de la reacción química, presente como reactante o como producto de la reacción, varían con el tiempo hasta alcanzar el estado final. (Fonseca Gonzales & Berrocal Barrantes, 2004)

La reacción para obtener 1,3-butadieno



Donde:

- $-r_1$: velocidad de la reacción

La velocidad de reacción se la puede expresar de la siguiente manera:

$$-r_1 = k_i * P_{C_4H_{10}}^m * P_{O_2}^n \quad (5.6)$$

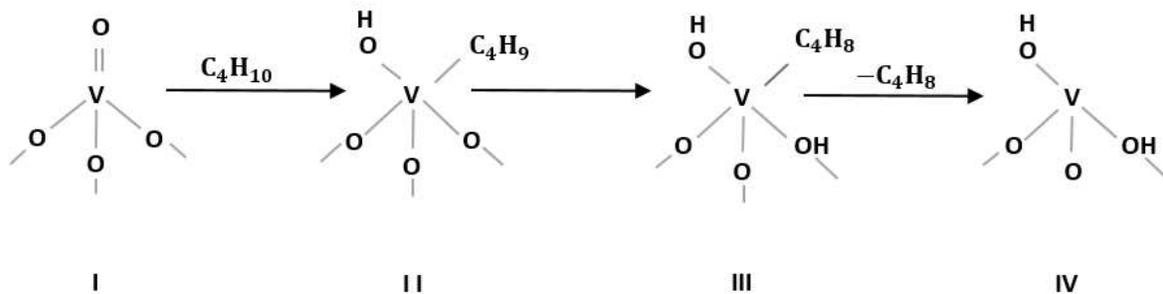
Donde:

- k_i : la constante cinética.
- $P_{C_4H_{10}}$: presión parcial del n-butano.
- P_{O_2} : presión parcial del oxígeno.
- m, n : constantes.

5.4.2. Mecanismo de reacción

El mecanismo de reacción consiste en una descripción de los pasos en el cual un compuesto químico se transforma en otro compuesto químico. (Douglas, McDaniel, & Alexander, 1994)

Figura 5.6: Mecanismo de reacción para la deshidrogenación oxidativa del n-butano.



Fuente: (Owen & Kung, 1993)

El mecanismo se representa esquemáticamente en la figura 5.8, tenemos el estudio de la deshidrogenación oxidativa del n-butano, se estudió los catalizadores de óxido de vanadio soportado sobre sílice, se propuso un mecanismo similar al que tiene la deshidrogenación oxidativa del etano. (Owen & Kung, 1993)

La activación de las moléculas de n-butano por las especies de vanadio dispersas, dan lugar a la formación de especies tipo II. La ruptura del enlace C-H dan lugar a la formación de las

especies tipo III, y tras la desorción del alquenos se generarían las especies de tipo IV. (Armas Marin, 2004)

5.5. Catálisis

El termino catálisis agrupa un conjunto de procedimientos y conocimientos que permiten que la velocidad con la que transcurre una reacción se incremente in situ. La catálisis es una rama de la cinética química. (Fuentes & Diaz, 2016)

5.5.1. Catalizadores para la deshidrogenación oxidativa del n-butano

En la deshidrogenacion oxidativa del n-butano para obtener como producto principal el 1,3-butadieno se tiene distintos catalizadores según distintas investigaciones que se tuvo, se tiene diversos catalizadores que están basados en óxidos mixtos de elementos metálicos como: Molibdeno, Cobalto, Níquel, Bismuto, Magnesio y Vanadio.

Tabla 5.6: Catalizadores utilizados para la deshidrogenacion oxidativa del n-butano.

Catalizador	Temperatura [°C]	Conversión del n-butano [%]	Selectividad a butenos [%]	Selectividad a 1,3-butadieno [%]
CoO-MoO ₃	550	30	48	25
MgO-Moo ₃	630	50	10	44
V-Mg-O	540	56	13	37
ZnO	450	13	65	0,7
ZnFe ₂ O ₄	450	11	67	0,9
ZnFe ₂ O ₄ -ZnO	450	12	16	22
Bi ₂ O ₃ /MoO ₃	560	10	42	11
β-Bi ₂ Mo ₂ O ₉ /Al ₂ O ₃	450	32	14	23
V ₂ O ₅ /SiO ₂	540	23	39	7
Ni-V-Sb/Al ₂ O ₃	630	39	31	42
Sn-V-Sb/Al ₂ O ₃	630	38	31	36
Bi-V-Sb/Al ₂ O ₃	630	36	32	33

Fuente: (Armas Marin, 2004)

En la tabla 5.6, tenemos las propuestas de los catalizadores para la Deshidrogenacion Oxidativa del n-butano, identificando que el catalizador de V-Mg-O, es uno de los catalizadores que se ha estudiado de manera más amplia a diferencia de los otros sistemas de Vanadio soportado, que son utilizados también en la oxidación del n-butano para obtener como producto el anhídrido maleico.

Estos catalizadores tienen un comportamiento catalítico favorable en reacciones de deshidrogenación oxidativa para obtener como productos olefinas a partir de alcanos, estos catalizadores son activos en rangos de temperaturas de reacción razonables, entre 500 y 550 [°C]. Debido a que el butadieno es un producto intermedio menos estable, lo que hace que la selectividad tienda a pasar por un máximo de conversión de n-butano del 60%. (Armas Marin, 2004)

En el sistema V-Mg-O, presenta distintas estructuras según la relación V/Mg al igual que su estado de oxidación del vanadio. El catalizador de V-Mg-O soportado en sílice se tiene las siguientes ventajas como: la resistencia mecánica para soportar el desgaste en el interior del reactor, la afinidad es mínima en la interacción con el vanadio.

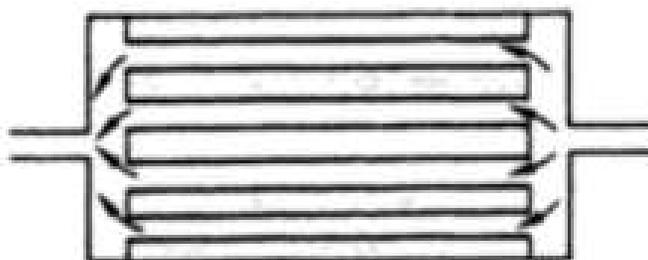
5.6. Diseño del reactor para obtener 1,3-butadieno

5.6.1. Reactor de lecho fijo

El reactor de lecho fijo en sus diversas configuraciones, constituye una unidad fundamental de proceso en la que se basa en la producción de una variedad de sustancias químicas, este tipo de reactor se utiliza en la gran mayoría de los procesos catalíticos que se llevan a cabo en la fase gaseosa. (Santamaria, Herguido, Menendez, & Monzon, 1999)

El reactor de lecho fijo es un reactor tubular que está empacado de partículas sólidas (catalizador). El catalizador se puede colocar en uno o más lechos fijos (es decir, a través de las capas del reactor) o puede ser distribuido en una serie de tubos largos paralelos.

Figura 5.7: Reactor catalítico de lecho fijo-longitudinal.



Fuente: (Coulson & Richardson, 1984)

Las reacciones en la fase gaseosa se efectúan primordialmente en reactores tubulares en los que el flujo suele ser turbulento. Se supone que no hay dispersión, gradientes radiales de

temperatura, velocidad, concentración, se puede modelar el reactor como flujo tapón. (Fogler, 2001)

5.6.2. Reactor de flujo pistón

El reactor de flujo pistón, consiste en un tubo dentro del cual fluye el medio de la reacción, el flujo pistón es una idealización del modelo de flujo de fluido por un reactor tubular, donde se hace la suposición que todos los elementos del fluido se mueven con una velocidad uniforme y constante a lo largo de las líneas paralelas de la corriente, los efectos de dispersión radial o longitudinal son despreciables.

En el diseño de estos reactores se realiza teniendo en cuenta la variación de la composición a lo largo del reactor. (Santamaria, Herguido, Menendez, & Monzon, 1999)

En la tabla 5.7 se indica las ventajas y desventajas que tiene este reactor.

Tabla 5.7: Ventajas y desventajas del reactor de flujo pistón.

Ventajas	Desventajas
Fácil mantenimiento (sin partes móviles).	Costo de instrumentación elevada.
Alta conversión por volumen de reactor.	Alto costo de operación (mantenimiento, limpieza).
Alto rendimiento.	Difícil control de la temperatura (exotérmica).
Poco o nada de retro mezclado.	Consideraciones en el diseño del reactor.

Fuente: Elaboración propia en base a (Santamaria, Herguido, Menendez, & Monzon, 1999).

Según el libro de Santamaría cuando se realiza el diseño riguroso de un reactor de lecho fijo no es necesario realizar los niveles de complejidad, a menudo se puede realizar simplificaciones (como considerar una operación isoterma o despreciar alguna de las resistencias a la transferencia de materia) que facilitan notablemente para el cálculo.

La ecuación de diseño del reactor de flujo tapón es la siguiente:

$$V = F_{AO} \int_0^X \frac{dX}{-r_A} \quad (5.7)$$

Para el diseño del reactor multitubular de lecho fijo utilizaremos una serie de pasos, para que el lector pueda entender de una manera sencilla, todas las ecuaciones que se muestran en el diseño se encuentra su procedimiento de deducción de fórmulas en el Anexo B.

Realizaremos el diseño del reactor con los siguientes datos de la tabla 5.8.

Tabla 5.8: Datos de las corrientes de entrada al reactor.

Parámetros	Valor numérico
Flujo molar del n-butano $\left[\frac{\text{mol}}{\text{s}}\right]$	65,846
Temperatura de entrada del n-butano $[\text{°C}]$	500,000
Presión de entrada del n-butano [kPa]	100,000
Flujo molar del oxígeno $\left[\frac{\text{mol}}{\text{s}}\right]$	51,031
Temperatura de entrada del oxígeno $[\text{°C}]$	25,000
Presión de entrada del oxígeno [kPa]	100,000
Constante universal de los gases $\left[\frac{\text{J}}{\text{mol}\cdot\text{k}}\right]$	8,314
Numero de tubos	800,000
Diámetro de los tubos [cm]	9,000

Fuente: Elaboración propia en base a los datos de la patente.

Paso 1: Determinación de la concentración inicial del n-butano y oxígeno.

Para el n-butano.

$$C_{C_4H_{10_0}} = \frac{P_{C_4H_{10_0}}}{R * T_0} \quad (5.8)$$

Donde:

- $P_{C_4H_{10_0}}$: presión parcial inicial del n-butano
- R : constante universal de los gases.
- T_0 : temperatura de entrada al reactor del n-butano.

Reemplazando datos en la ecuación (5.8).

$$C_{C_4H_{10_0}} = \frac{1 * 10^5 \text{ [Pa]}}{8,314 \left[\frac{\text{J}}{\text{mol} * \text{k}}\right] * 773 \text{ [k]}}$$

$$C_{C_4H_{10_0}} = 15,560 \left[\frac{\text{mol}}{\text{m}^3}\right]$$

Para el oxígeno.

$$C_{O_{2_0}} = \frac{P_{O_{2_0}}}{R * T_0} \quad (5.9)$$

Donde:

- $P_{O_2_0}$: presión parcial inicial del oxígeno.
- R : constante universal de los gases.
- T_0 : temperatura de entrada al reactor del oxígeno.

Reemplazando datos en la ecuación (5.9).

$$C_{O_2_0} = \frac{1 * 10^5 \text{ [Pa]}}{8,314 \left[\frac{\text{J}}{\text{mol} * \text{k}} \right] * 298[\text{k}]}$$

$$C_{O_2_0} = 40,362 \left[\frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \right]$$

Paso 2: Determinación del factor de expansión.

$$\varepsilon = \frac{n_{\text{prod.}} - n_{\text{react.}}}{n_{C_4H_{10}(\text{R.L.})}} * y_{C_4H_{10}O} \quad (5.10)$$

Donde:

- $n_{\text{prod.}}$: moles estequiométricos de los productos, la suma de los coeficientes estequiométricos de los productos.
- $n_{\text{react.}}$: moles estequiométricos de los reactivos, la suma de los coeficientes estequiométricos de los reactivos.
- $n_{C_4H_{10}(\text{R.L.})}$: moles estequiométricos del reactivo limitante, coeficiente estequiométrico del reactivo limitante.
- $y_{C_4H_{10}O}$: composición inicial del reactivo limitante.

$$\varepsilon = \frac{(2 + 1) - (1 + 1)}{1} * 0,704$$

$$\varepsilon = 0,704$$

Paso 3: Determinación de la temperatura final para tener una conversión del 60%, valor de la conversión de n-butano que se obtuvo de la fuente bibliográfica.

$$X = \frac{\sum \int_{T_i}^T \theta_i * C_{p_i} dT}{-\left[\Delta H_{\text{Rx}}^\circ + \int_{298}^T \Delta C_P dT \right]} \quad (5.11)$$

Donde:

- X : conversión del n-butano.

- C_{p_i} : capacidad calorífica a presión constante.
- $\Delta H_{R_{XX}}^\circ$: entalpía estándar de formación.

Paso 4: Determinación de la entalpía de formación.

$$\Delta H_{R_{XX}}^\circ = 2 * \Delta H_{H_2O}^\circ + \Delta H_{C_4H_6}^\circ - \Delta H_{C_4H_{10}}^\circ - \Delta H_{O_2}^\circ \quad (5.12)$$

Tabla 5.9: Entalpía de formación y capacidad calorífica en función de la temperatura.

Compuesto	ΔH° [J/mol]	$C_p(T)$ [J/mol * k]
H ₂ O	-241.818	$3,954 + 37,126 * 10^{-2} * T - 18,327 * 10^{-5} * T^2$
C ₄ H ₆	110.200	$25,461 + 1,519 * 10^{-2} * T - 0,715 * 10^{-5} * T^2$
C ₄ H ₁₀	-124.700	$-5,398 + 34,938 * 10^{-2} * T - 23,356 * 10^{-5} * T^2$
O ₂	0	$32,218 + 0,192 * 10^{-2} * T + 1,055 * 10^{-5} * T^2$

Fuente: Elaboración propia en base a (Hull,1987).

Reemplazando datos en la ecuación (5.12):

$$\Delta H_{R_{XX}}^\circ = [2 * (-241.818) + (110.200) - (-124.700) - 0] \left[\frac{J}{mol} \right]$$

$$\Delta H_{R_{XX}}^\circ = -248.736 \left[\frac{J}{mol} \right]$$

Paso 5: Determinación de ΔC_p .

$$\Delta C_p = \sum C_{p_{productos}} - \sum C_{p_{reactivos}} \quad (5.13)$$

Reemplazando datos en la ecuación (5.13).

$$\Delta C_p = (2 * C_{p_{H_2O}} + 1 * C_{p_{C_4H_6}}) - (1 * C_{p_{O_2}} + 1 * C_{p_{C_4H_{10}}})$$

$$\Delta C_p = 29,624 - 3,32 * 10^{-2}T - 2,2 * 10^{-5}T^2$$

Paso 6: Determinación de θ_i .

$$\theta_{C_4H_{10}} = 1 \quad (5.14)$$

$$\theta_{O_2} = \frac{F_{O_2 0}}{F_{C_4H_{10} 0}} \quad (5.15)$$

Donde:

- F_{O_2} : flujo molar del oxígeno.
- $F_{C_4H_{10}}$: flujo molar del n-butano.

Reemplazando datos en la ecuación (5.15).

$$\theta_{O_2} = \frac{51,031 \left[\frac{\text{mol}}{\text{s}} \right]}{65,846 \left[\frac{\text{mol}}{\text{s}} \right]}$$

$$\theta_{O_2} = 0,775$$

Paso 7: Determinando la expresión $\sum \int_{T_i}^T \theta_i * C_{p_i} dT$.

$$\sum \int_{T_i}^T \theta_i * C_{p_i} dT = \int_{T_i}^T (\theta_{C_4H_{10}} * C_{p_{C_4H_{10}}} + \theta_{O_2} * C_{p_{O_2}}) dT \quad (5.16)$$

Reemplazando datos en la ecuación (5.16):

$$\sum \int_{T_i}^T \theta_i * C_{p_i} dT = \int_{T_i}^T (23,686 + 38,304 * 10^{-2}T - 18,801 * 10^{-5}T^2) dT$$

Reemplazando datos en la ecuación (5.11):

$$0,6 = \frac{23,686(T - 773) + 38,304 * 10^{-2} \frac{(T^2 - 773^2)}{2} - 18,801 * 10^{-5} \frac{(T^3 - 773^3)}{3}}{24,8736 - 29,624(T - 298) + 3,32 * 10^{-2} \frac{(T^2 - 298^2)}{2} + 2,2 * 10^{-5} \frac{(T^3 - 298^3)}{3}}$$

Realizando operaciones se tiene la siguiente solución:

$$T = 1.620[K]$$

Paso 8: Determinación de la velocidad de reacción.

$$-r_i = e^{-\frac{E_{ai}}{R} \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_m} \right]} * (T_0 * R)^{m+n} * \left(C_{C_4H_{10}} * \frac{1-X}{1+\epsilon X} \right)^m * \left(\left[\frac{C_{O_2} - C_{C_4H_{10}} * X}{1+\epsilon X} \right] \right)^n \quad (5.17)$$

Donde:

- k_i : la constante cinética.
- $P_{C_4H_{10}}$: presión parcial del n-butano.
- P_{O_2} : presión parcial del oxígeno.
- m, n : constantes.

- E_{ai} : energía de activación.
- R : constante universal de los gases.
- T : temperatura.
- T_m : temperatura.
- ε : el factor de expansión.
- C_{O_2} : concentración del oxígeno.
- $C_{C_4H_{10}}$: concentración del n-butano.
- $C_{C_4H_{10_0}}$: concentración inicial del n-butano.

Reemplazando datos en la ecuación (5.17).

$$-r_i = 1,56741 * 10^{-10} e^{-\frac{162.300}{8,314} * \left[\frac{1}{1,620} - \frac{1}{773} \right]} * (773 * 8,314)^{1,003+0,123} * \left(15,56 * \frac{1-X}{1+0,704X} \right)^{1,003} * \left(\frac{40,362 - 15,56 * X}{1+0,704X} \right)^{0,123} \left[\frac{\text{mol}}{\text{s} * \text{m}^3} \right]$$

La expresión se reduce a:

$$-r_i = 1,6493 * \left(15,56 * \frac{1-X}{1+0,704X} \right)^{1,003} * \left(\frac{40,362 - 15,56 * X}{1+0,704X} \right)^{0,123} \left[\frac{\text{mol}}{\text{s} * \text{m}^3} \right]$$

Reemplazando la velocidad de reacción en la ecuación (5.7).

$$V = F_{C_4H_{10_0}} \int_0^X \frac{dX}{1,6493 * \left(3,112 * \frac{1-X}{1+0,704X} \right)^{1,003} * \left(\frac{8,072 - 3,112 * X}{1+0,704X} \right)^{0,123}}$$

Paso 9: Analizando la integral

$$I = \int_0^X \frac{dX}{1,6493 * \left(3,112 * \frac{1-X}{1+0,704X} \right)^{1,003} * \left(\frac{8,072 - 3,112 * X}{1+0,704X} \right)^{0,123}} \left[\frac{\text{s} * \text{m}^3}{\text{mol}} \right]$$

Donde el volumen del reactor está dado por la siguiente formula en función de la integral "I".

$$V = F_{C_4H_{10_0}} * I \quad (5.18)$$

Se puede resolver por integración numérica mediante el método del trapecio, analizaremos la integrar en función de la velocidad de reacción como se tiene en la ecuación 5.19:

$$I = \int_0^X \frac{1}{(-r_A)} dx \quad (5.19)$$

Para resolver por el método del trapecio se tendrá la siguiente ecuación:

$$I = \frac{1}{2} \sum [(X_{i+1} - X_i) \left(\frac{1}{(-r_A)_{i+1}} + \frac{1}{(-r_A)_i} \right)] \quad (5.20)$$

Se tiene el siguiente resultado:

Tabla 5.10: Resultados del método de integración numérica.

#	X_i	$-r_{A_i}$	$X_{i+1} - X_i$	$\frac{1}{(-r_A)_{i+1}} + \frac{1}{(-r_A)_i}$	$[(X_{i+1} - X_i) \left(\frac{1}{(-r_A)_{i+1}} + \frac{1}{(-r_A)_i} \right)]$
1	0,0	6,659	0,2	0,370	0,074
2	0,2	4,544	0,2	0,558	0,112
3	0,4	2,955	0,2	0,917	0,183
4	0,6	1,729			
Total					0,369

Fuente: Elaboración propia.

En la tabla 5.11 tenemos el resultado de la sumatoria y reemplazamos en la ecuación (5.20), para obtener el valor de la Integral.

$$I = \frac{1}{2} * 0,3691 \left[\frac{s * m^3}{mol} \right]$$

$$I = 0,185 \left[\frac{s * m^3}{mol} \right]$$

Debido a que tenemos el valor numérico de la integral, reemplazamos en la ecuación (5.18).

$$V = 65,846 \left[\frac{mol}{s} \right] * 0,185 \left[\frac{s * m^3}{mol} \right]$$

$$V = 12,182 [m^3]$$

Paso 10: Determinando la longitud del reactor si el número de tubos es 800, el diámetro de los tubos es de 9 [cm].

Si se tiene la siguiente ecuación para determinar la longitud del tubo en función del volumen del reactor y el diámetro del tubo.

$$V_{\text{reactor}} = N * \frac{\pi}{4} * \phi_{\text{Tubo}}^2 * L \quad (5.21)$$

Donde:

- V_{reactor} : volumen del reactor [m^3].
- N : número de tubos.
- $\varnothing_{\text{Tubo}}$: diámetro del tubo [m].
- L : longitud del reactor [m].

Despejando la longitud de la ecuación (5.21):

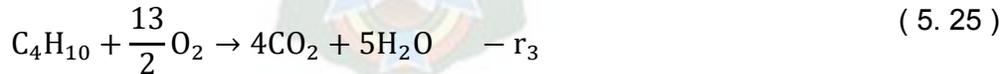
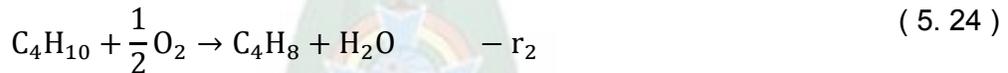
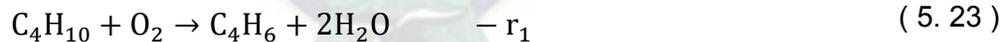
$$L = \frac{V_{\text{reactor}}}{N * \frac{\pi}{4} * \varnothing_{\text{Tubo}}^2} \quad (5.22)$$

Reemplazando datos en la ecuación (5.22):

$$L = \frac{V_{\text{reactor}}}{N * \frac{\pi}{4} * \varnothing_{\text{Tubo}}^2}$$
$$L = \frac{12,182[\text{m}^3]}{800 * \frac{\pi}{4} * (0,09[\text{m}])^2}$$
$$L = 2,10[\text{m}]$$

5.6.3. Diseño del reactor tubular de lecho fijo por el simulador Aspen Hysys v 8.8.

Las reacciones en el reactor multitubular son las siguientes:



Donde:

- $-r_1, -r_2$ y $-r_3$: velocidad de reacción.

La velocidad de reacción está dada por la siguiente ecuación:

$$r_i = k_i * P_{\text{C}_4\text{H}_{10}}^m * P_{\text{O}_2}^n \quad (5.26)$$

Donde:

- k_i : la constante cinética.
- $P_{C_4H_{10}}$: presión parcial del n-butano.
- P_{O_2} : presión parcial del oxígeno.
- m, n : constantes.

La constante cinética está dada por la siguiente ecuación:

$$k_i = K_i e^{-\frac{E_{ai}}{R} \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_m} \right]} \quad (5.27)$$

Donde:

- E_{ai} : energía de activación.
- R : constante universal de los gases.
- T : temperatura.
- T_m : temperatura.

Tabla 5.11: Factor de frecuencia y energía de activación de las reacciones.

Reacción	Producto	$k \left[\frac{\text{mol}}{\text{s} * \text{m}^3 * \text{Pa}^{m+n}} \right]$	$E_a \left[\frac{\text{J}}{\text{mol}} \right]$	m	n
1	Butadieno	$1,56741 * 10^{-10}$	162.300	1,003	0,123
2	1-buteno	$1,99427 * 10^{-10}$	146.500	1,043	0,099
3	CO ₂	$1,32103 * 10^{-10}$	121.500	0,930	0,335

Fuente: Elaboración propia en base a (Santamaria, Herguido, Menendez, & Monzon, 1999).

La velocidad de reacción de las tres reacciones en paralelo será:

$$-r_1 = 1,56741 * 10^{-10} e^{-\frac{162.300}{R} \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_m} \right]} P_{C_4H_{10}}^m * P_{O_2}^n \quad (5.28)$$

$$-r_2 = 1,99427 * 10^{-10} e^{-\frac{146.500}{R} \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_m} \right]} P_{C_4H_{10}}^m * P_{O_2}^n \quad (5.29)$$

$$-r_3 = 1,32103 * 10^{-10} e^{-\frac{121.500}{R} \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_m} \right]} P_{C_4H_{10}}^m * P_{O_2}^n \quad (5.30)$$

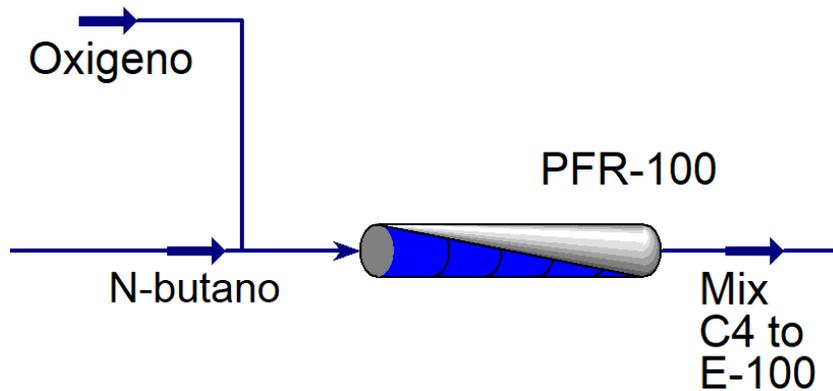
Donde:

- k_i : la constante cinética.
- $P_{C_4H_{10}}$: presión parcial del n-butano.
- P_{O_2} : presión parcial del oxígeno.
- m, n : constantes.

- R : constante universal de los gases.
- T : temperatura

Ingresando los datos en el simulador Aspen Hysys v 8.8, la velocidad de reacción de la tabla 5.12, los que se tiene en la tabla 5.8 con las características de las corrientes de entrada y parámetros del reactor.

Figura 5.8: Reactor flujo pistón.



Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

En la figura 5.8 tenemos reactor de flujo pistón multitubular en el simulador Aspen Hysys v 8.8, con las corrientes de entrada de n-butano y oxígeno, la corriente obtenida en el proceso de deshidrogenación es la mezcla de n-butano, 1-buteno, 1,3-butadieno y dióxido de carbono.

Tabla 5.12: Resultados obtenidos en el reactor de flujo pistón.

Corriente	Mix C4 to E-100
Fracción de vapor	1,000
Temperatura [C]	1235,091
Presión [kPa]	20,000
Flujo molar [kgmole/h]	606,127
Fracción molar del n-Butano	0,049
Fracción molar del 1-Buteno	0,096
Fracción molar del 13-Butadieno	0,242
Fracción molar del H2O	0,598
Fracción molar del CO2	0,014

Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

5.6.4. Resumen de resultados obtenido por el método analítico y el simulador Aspen Hysys v 8.8 en el diseño del reactor.

En la tabla 5.14 tenemos un resumen de resultados obtenidos en el método analítico y mediante el simulador para el reactor multitubular. En ambos métodos se realizó el diseño según conceptos teóricos asumiendo presión constante y teniendo un reactor multitubular de lecho fijo adiabático.

Tabla 5.13: Resultados del diseño del reactor de deshidrogenación oxidativa del n-butano.

Parámetros	Reactor diseñado analíticamente	Reactor diseñado en Aspen Hysys	% Diferencia respecto al diseño analítico
Longitud [m]	2,10	2,50	19,05
Volumen [m]	12,18	12,72	4,42
Diámetro [m]	0,09	0,09	0,00
Numero de tubos	800,00	800,00	0,00
Temperatura final en el reactor [°C]	1347,00	1235,00	9.06

Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

En el diseño del reactor tanto de manera analítica y mediante el simulador Aspen Hysys v 8.8 se tiene diferencias en los distintos resultados obtenidos en algunos parámetros, debido a que en el simulador se trabajó con el paquete de fluidos Peng Robinson-Stryjec-Vera y en el método analítico se trabajó con la ecuación de estado de un gas ideal, los resultados obtenidos en ambos métodos, no se tiene una gran diferencia, en el volumen, longitud y la temperatura final.

5.7. Simulación de la Planta de 1,3-Butadieno.

El modelo de la Planta petroquímica se realizó con el simulador Aspen Hysys v 8.8, también se realizó el diseño analítico del reactor de lecho fijo para obtener 1,3-butadieno a partir de n-butano.

En la simulación de la planta tenemos etapas muy importantes, las cuales se encuentran en la figura 5.9. la corriente de n-butano será obtenida de la Planta de Separación de Líquidos Gran Chaco y la corriente de oxígeno, serán la alimentación en el proceso.

En la etapa de conversión se tiene el proceso de deshidrogenación oxidativa en el reactor multitubular de lecho fijo, en esta etapa el n-butano se deshidrogena parcialmente en un reactor de deshidrogenación sobre un catalizador de V-Mg-O soportado en sílice para dar 1,3-butadieno, 1-buteno y dióxido de carbono, en el reactor multitubular los tubos de reacción son de 10 [cm] operando a 500 [°C] y 20 [kPa].

La tabla 5.14 son los datos para ingresar al simulador Aspen Hysys v 8.8, son los datos de corrientes de n-butano y oxígeno que ingresan al reactor de flujo piston.

Tabla 5.14: Condiciones de la materia prima en la alimentación.

Corriente	n-butano	oxígeno
Temperatura [°C]	500	25
Presión [kPa]	20	20
Flujo Molar [kg*mol/h]	237	190
Componente	Fracción Molar	Fracción Molar
N-butano	1	0
Oxígeno	0	1

Fuente: Elaboración propia en base a la patente.

El 1-buteno pasa posteriormente a un proceso de deshidrogenación oxidativa para obtener mayor cantidad de 1,3-butadieno, el 1-buteno junto con el n-butano que no reacciona se recupera en la columna de destilación extractiva como reciclaje en el proceso.

En el proceso de reacción la temperatura es mayor a los 1.000 [°C], debido a este aumento de temperatura pasa por una zona de enfriamiento después del proceso de conversión de n-butano a 1,3-butadieno, debido a este aumento de temperatura pasa por una zona de enfriamiento después del proceso de conversión de n-butano a 1,3-butadieno.

En la etapa de absorción del dióxido de carbono, el gas ácido procedente de la etapa de conversión. El gas es recibido en un separador flash donde se remueve el agua. El gas ácido con los datos que se tiene en la tabla 5.16, fluye hacia la torre contactora de amina/gas que consta de 20 etapas, el gas entra por la parte inferior a 1.200 [kPa] y en contracorriente la amina que entra por la parte superior de la columna contactora, mediante el proceso de absorción la amina remueve el dióxido de carbono hasta obtener un gas dulce, el gas dulce sale por el tope de la columna y la amina rica sale por la parte inferior de la columna de absorción y es enviada a la sección de regeneración de amina.

En la sección de regeneración de amina, la amina rica proveniente de la columna de absorción se envía hacia una válvula donde se reduce la presión hasta 550 [kPa], para luego ser enviada a un separador flash donde se separa hidrocarburos ligeros de la solución de amina rica, la amina rica proveniente del separador se envía a un intercambiador de calor amina rica/amina pobre para adecuar la temperatura al ingreso de la corriente de amina rica a la columna de regeneración, por la parte superior sale el dióxido de carbono con trazas de butanos y por la parte inferior sale la amina pobre que será enviada nuevamente a la columna de absorción mediante una bomba de amina pobre.

La tabla 5.15 son los datos para ingresar al simulador Hysys v 8.8, son los datos de la solución de amina que ingresa a la columna absorbidora y la corriente de gas con contenido de dióxido de carbono.

Tabla 5.15: Condiciones de la mezcla de C4 y solución de amina.

Corriente	Gas to Contactor	DEA to Contactor
Temperatura [°C]	70	95
Presión [kPa]	1200	1190
Flujo Molar [kg*mol/h]	247,6	371
Componente	Fracción Molar	Fracción Másica
n-butano	0,1209	0,00
1-buteno	0,0245	0,00
1,3-butadieno	0,7950	0,00
Dióxido de carbono	0,0349	0,00
Agua	0,0248	0,28
DEA	0,0000	0,72

Fuente: Elaboracion propia en base a la patente.

En la etapa de recuperación de 1,3-butadieno, la corriente de butanos proveniente de la etapa de absorción de dióxido de carbono se envía a una columna de destilación extractiva que tiene 50 etapas, opera 290 [kPa] en el condensador y 300 [kPa] en el reboiler, la mezcla de butanos ingresa en la etapa 40 y el furfural ingresa en la etapa 3, por la parte superior se obtiene una mezcla de n-butano, 1-buteno y trazas de 1,3-butadieno y la corriente que se tiene por la parte inferior de la columna es una mezcla de furfural, 1,3-butadieno y trazas de n-butano.

Para la recuperación de 1,3-butadieno se utilizó la destilación extractiva debido a que esta mezcla tiene estrechos puntos de ebullición, el solvente que se utilizara en el proceso es el

Furfural, según (Housan & Bellagi, 2013) es uno de los mejores solventes y es apropiado para la recuperación de 1,3-butadieno. El furfural tiene un ciclo donde se recupera en otra columna por la parte inferior y esta corriente vuelve a circular en el sistema, y en la corriente superior se obtiene el 1,3-butadieno crudo, la corriente de fondo obtenido en la columna de destilación extractiva se dirige a otra columna de recuperación de solvente.

La columna para recuperar como producto principal 1,3-butadieno y regenerar el disolvente “furfural”, la regeneración se realiza en una columna de destilación operando a 200 [kPa] con un recalentador y condensador. La alimentación en esta columna de destilación son los fondos de la columna de destilación extractiva con furfural, el furfural se obtiene como producto de fondo y el 1,3-butadieno se obtiene como producto de cima, la corriente de furfural se recircula nuevamente para que siga operando en el ciclo con el objetivo de recuperar el 1,3-butadieno de la mezcla obtenida en la etapa de conversión.

En la tabla 5.16 se tiene las condiciones de entrada de la mezcla de butanos que se alimenta en la columna de destilación extractiva con el solvente furfural.

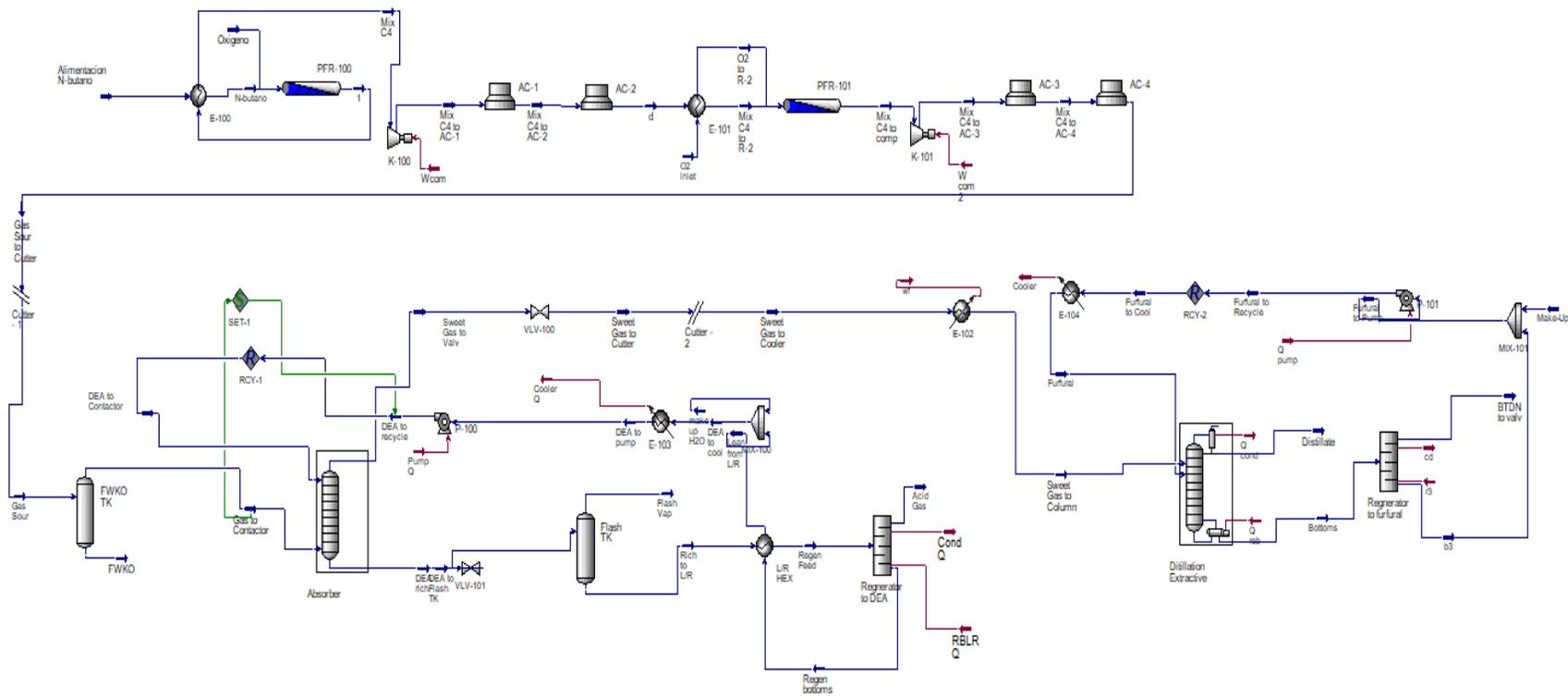
Tabla 5.16: Condiciones de entrada de la mezcla de C4 y furfural a la columna de destilación extractiva.

Corriente	Sweet gas to column	Furfural
Temperatura [°C]	20	20
Presión [kPa]	430	420
Flujo Molar [kg*mol/h]	246	1350
Componente	Fracción Molar	Fracción Másica
n-butano	0,1206	0
1-buteno	0,0246	0
1,3-butadieno	0,7717	0
Dióxido de carbono	0,0028	0
Oxígeno	0,0000	0
Agua	0,0793	0
Furfural	0,0000	1

Fuente: Elaboración propia en base a Aspen Hysys v 8.8 .

Con una pureza del 1,3-butadieno mayor al 90%. En la simulación de la planta de 1,3-butadieno se obtuvo la corriente de butadieno crudo con un contenido mayor del 90% molar, con las impurezas como dióxidos de carbono, y cantidades mínimas de n-butano y 1-buteno.

Figura 5.9: Modelo de la planta con el simulador Aspen Hysys v 8.8 para la producción de 1,3-butadieno.



Fuente: Elaboracion propia con el simulador Aspen Hysys v 8.8.

5.8. Seguridad Industrial y Medio Ambiente

La implementación de la planta de 1,3-butadieno, en las etapas de construcción y operación de la planta es muy importante el bienestar del personal, el ambiente de trabajo. Es muy importante la aplicación de las siguientes normas que se tiene en la industria petrolera:

Tabla 5.17: Normas importantes en la Seguridad Industrial y M.A.

Normativa	Descripción
Occupational Health and Safety Management Systems (OSHA 18001)	Esta norma es desarrollado para mejorar la empresas de manera continua la seguridad y salud en el trabajo a todos sus trabajadores.
DL 16998 Ley General de Higiene, Seguridad Ocupacional y Bienestar.	El objetivo de esta norma es garantizar las condiciones adecuadas salud, higiene, seguridad y bienestar en el trabajo. Lograr un ambiente desprovisto de riesgos para los trabajadores, proteger a las personas y al medio ambiente.
International Organization for Standardization (ISO 14001)	El objetivo es implementar un Sistema de Gestión Ambiental, consiguiendo que las empresas sean comprometidas y responsables del cuidado del medio ambiente.
Reglamentación de La Ley N°1333 del Medio Ambiente “ Reglamento para actividades de Sustancias Peligrosas”	Esta ley permite proteger y la conservar el medio ambiente y recursos naturales, fijando los procedimiento, registrando y controlando las actividades con sustancias peligrosas.
Reglamento Ambiental para el Sector de Hidrocarburos (RASH)	Este reglamento permite regular, establecer límites y procedimientos para las actividades en el sector de hidrocarburos que se lleven efecto en todo el territorio boliviano, en las distintas actividades desde la exploración hasta las comercialización, cuyas operaciones producen impactos ambientales y/o sociales con el medio ambiente.
Reglamento Ambiental para el Sector Manufacturero (RASIM)	Este reglamento permite reducir la generación de contaminantes y el uso de sustancias peligrosas, optimizando los recursos naturales y energía para la protección y conservación del medio ambiente.

Fuente: Elaboración propia

La seguridad industrial es una filosofía operativa de la organización que debe ser aplicada con la misma convicción con que se busca la calidad en la producción. La seguridad industrial es responsabilidad de todos y afecta a todos en la empresa. (Daza, 2018)

- Autoridades
- Empleadores
- Empleados

5.8.1. Equipo de protección personal

Los equipos de protección personal son elementos de uso individual destinados a dar protección al trabajador frente a eventuales riesgos que puedan afectar su integridad durante el desarrollo de sus labores. (Molinos , Abrego, & Ruiz, 2010)

El personal debe utilizar el siguiente equipo de protección personal:

- Equipos de protección auditiva.
- Equipos de protección ocular.
- Equipos de protección de la cabeza.
- Equipos de protección parcial o total del rostro.
- Equipos de protección respiratoria.
- Equipos de protección de extremidades inferiores.
- Equipos de protección de extremidades superiores.

5.8.2. La normativa según la OSHA

La norma OSHA es muy importante para reducir lesiones, enfermedades y muertes en el trabajo, esta norma indica los límites de exposición ante la exposición de los trabajadores al 1,3-butadieno en el lugar de trabajo.

- Los límites de exposición permisibles de 1 parte por millón en promedio por un tiempo de 8 horas y 5 ppm como límite de exposición a corto plazo a un cuarto de hora.
- La necesidad de controles adicionales ante un derrame producido en el lugar de trabajo.
- Establecer un programa para reducir el tiempo de exposición de los trabajadores en el lugar de trabajo, de esta manera se reducirá los niveles de exposición.
- Los trabajadores en el lugar de trabajo deben utilizar el equipo apropiado y ropa de protección al estar expuestos esta sustancia.

La norma también contiene requisitos para las zonas reguladas, planes de emergencia, comunicación de peligros y mantenimiento de registros.

5.8.3. Primeros auxilios

En todas las áreas de trabajo donde se manipule el 1,3-butadieno se debe tener las medidas de primeros auxilios ante cualquier tipo de exposición. La compañía Praxair México desarrollo

las medidas de primeros auxilios, las medidas que se aplican en caso de que se tenga exposición al 1,3-butadieno, en la tabla 5.20 describiremos las medidas de primeros auxilios a los diferentes tipos de exposición al 1,3-butadieno.

Tabla 5.18: Medidas de primeros auxilios a los diferentes tipos de exposición.

Tipo de exposición	Medidas de primeros auxilios
Inhalación	<ul style="list-style-type: none"> • Se debe retirar a la víctima a un lugar donde se tenga aire fresco. • Se debe administrar aire artificial si la víctima no respira. • Si la situación se complica, llamar a un médico.
Contacto con la piel	<ul style="list-style-type: none"> • Si hay exposición al líquido, se debe calentar con agua el área congelada a 105°F. • En caso de exposición masiva, se debe retirar la ropa mientras se aplica una ducha con agua tibia. • Se debe llamar a un médico.
Ingestión	Es poco probable la exposición de esta manera, debido a que el 1,3-butadieno se encuentra en estado gaseoso a condiciones normales de presión y temperatura.
Contacto ocular	<ul style="list-style-type: none"> • Si se tiene contacto con el 1,3-butadieno líquido, se debe enjuagar lo más rápido posible los ojos con abundante agua tibia en un tiempo aproximado de 15 minutos. Sosteniendo los párpados, abiertos y alejados de las orbitas de los ojos para asegurar que toda superficie ha sido enjuagada perfectamente. • Llamar a un oftalmólogo de manera inmediata.

Fuente: Elaboración propia.

5.8.4. Norma ISO 14001 Sistema de Gestión Ambiental

La norma ISO 14001 permite que la organización implementar en partes específicas para lograr sus objetivos, resultados que desean para mejorar el desempeño ambiental, donde la organización debe mantener y mejorar continuamente el sistema de gestión ambiental, de acuerdo a los requisitos de esta norma internacional.

La organización considerará el grado que se tendrá en el control sobre sus actividades, productos y perspectivas desde en su ciclo de vida. La determinación de su alcance no se utilizará para excluir actividades, productos servicios o instalaciones que tengan aspectos ambientales significativos.

Los objetivos principales de esta norma son:

- La protección del medio ambiente.
- Reducción de riesgos para las empresas.
- Exige el cumplimiento de las normas legales que se tenga.
- Mejora en gran medida el desempeño ambiental.

5.8.5. Contaminación del aire

La exposición al 1,3-butadieno en el ambiente de trabajo y en el aire, son considerados como un contaminante atmosférico peligroso y carcinógeno. Las concentraciones de 1,3-butadieno son más altas en lugares comerciales e industriales que en los lugares residenciales. (Curren, Dann, & Wang, 2006)

En la siguiente tabla se muestra el rango de concentraciones en el aire:

Tabla 5.19: Concentración de 1,3-butadieno en el aire ante la ausencia de una fuente conocida.

Medio	Rango de Concentración [$\mu\text{g} \cdot \text{m}^3$]
Aire Exterior	Área rural Rango de concentraciones medidas: de 0.01 a 0.5 Concentraciones medias diarias: entre 0,01 y 0,03
	Zona urbana o periurbana Promedio de los promedios de las campañas en áreas urbanas: 0.12 Promedio máximo de campañas en áreas urbanas: 0.19
Aire interior	Vivienda – Internacional Promedio de campaña entre 0.06 y 1.2
	Oficinas – Internacional Promedio de campaña entre 0.08 y 0.3 (EE.UU. y Reino Unido).
	Vehículos – Internacional Promedios de campaña entre 0.13 y 3.53 (EE.UU., Reino Unido, Irlanda y Suecia).
	Restaurantes y Bares – Internacional Promedios de campaña entre 0.22 y 2.25 (Reino Unido y Irlanda).

Fuente: (Bisson, Boulvert, Dallet, Hulot, & Marliere, 2019)

La tabla anterior se realizaron los estudios en el país de Francia y países como: EE.UU., Reino Unido, Irlanda y Suecia.

El interés en el 1,3-butadieno es debido a la preocupación que se tiene dentro de la comunidad ambiental. Las enmiendas a la ley de aire limpio de 1990 agregaron al 1,3-butadieno a la lista

de contaminantes más peligrosos del aire de la Agencia de Protección Ambiental. (Doyle, Sexton, Jefries, Bridge, & Jaspers, 2004)

Las principales fuentes de exposición debido a su alta volatilidad el 1,3-butadieno se encuentra en la atmosfera. (Bisson, Boulvert, Dallet, Hulot, & Marliere, 2019)

Las principales fuentes de exposición son:

- Antropogénico, fabricación de caucho, resinas y otras aplicaciones del 1,3-butadieno.
- Neopreno, escape de motor del automóvil, humo de cigarrillo, combustión de plásticos

Las exposiciones con mayor concentración de 1,3-butadieno son en el lugar de trabajo y puede encontrarse durante la producción el transporte, almacenamiento y uso en sus aplicaciones del 1,3-butadieno.

5.8.5.1. Medidas contra incendios

- Evacuar al personal en el área de riesgo.
- Enfriar de inmediato con roció de agua desde una distancia máxima el recipiente que contenía el 1,3-butadieno, teniendo precaución de no extinguir las llamas.
- Retirar las fuentes de energía, en caso que conlleve un riesgo.
- Retirar todos los cilindros del área de incendio, si no tiene riesgo el realizarlo.

5.8.6. Contaminación del suelo y agua

La presencia de 1,3-butadieno en el agua superficial no es tan peligroso como lo es en el aire, debido a que se volatiliza este compuesto, incluso si se libera este compuesto al agua, se espera que su concentración disminuya notablemente al aumenta la distancia desde la fuente.

No se tiene información sobre toxicidad para organismo terrestres que han sido expuestos al 1,3-butadieno, debido a las propiedades de este compuesto, no se cree que el suelo sea una vía importante de exposición, por lo tanto, no se tiene tanto riesgo cuando este compuesto es expuesto al suelo. (Institute for Health and Consumer Protection, 2002)

5.8.6.1. Medidas en caso de liberación ambiental

En caso de que se produzca un derrame se debe seguir los siguientes pasos:

- Se debe utilizar equipos de respiración autónomos, antes de ingresar al área afectada se debe tener dispositivos adecuados para revisar la atmosfera.

- Retirar las fuentes de energía, que en caso de estar en presencia de oxígeno suficiente puede ocasionar un incendio.
- Reducir los vapores con rocío de agua en forma de neblina o rocío fino.
- Ventilar el área afectada, retirar el recipiente que contiene 1,3-butadieno a un área ventilada.



CAPÍTULO VI

ANÁLISIS ECONÓMICO

6.1. INVERSIÓN TOTAL

En la implementación de la planta para la producción de 1,3-butadieno se debe analizar la viabilidad económica. Por esta razón se realizará el balance económico de todos los costes y por ello es muy importante el conocimiento de la inversión y para ello analizaremos primeramente el costo de los equipos.

Tabla 6.1: Costo de la inversión en la planta.

Concepto	Costo Material [\$u\$]	Costo de mano de obra [\$u\$]
Reactor tubular de lecho fijo (PRF-100)	10.350.318,1	3.622.611,3
Reactor tubular de lecho fijo (PRF-101)	7.720.867,2	2.702.303,5
Columna de Destilación (R-DEA)	635.224	222.328,4
Columna de Destilación (R-FURFURAL)	1.228.679,5	430.037,8
Columna de Destilación (DE)	2.008.333,3	702.916,7
Columna de Absorción (DEA)	552.969,2	193.539,2
Intercambiador de calor (E-100)	124.906,6	12.490,7
Intercambiador de calor (E-101)	124.906,6	12.490,7
Intercambiador de calor (L/R HEX)	169.032	16.903,2
Bomba (P-100)	75.369	7.536,9
Bomba (P-101)	123.931,6	12.393,2
Compresor (K-100)	3.579.568,2	357.956,8
Compresor (K-101)	3.983.964,2	398.396,4
Separador Flash (FWKO TK)	300.000	105.000,0
Separador Flash (FLASH TK)	300.000	105.000,0
Air Cooler (AC)	4	40.000
Costo total de maquinaria y equipos	31.318.069,5	
Aislamiento Térmico	3.131.806,9	4.697.710,4
Costo de tuberías y válvulas	15.659.034,7	15.659.034,7
Cimentaciones	1.565.903,5	2.348.855,2
Edificaciones	1.252.722,8	876.905,9
Estructuras	1.252.722,8	250.544,6
Material contra incendios	313.180,7	2.505.445,6
Electricidad	1.879.084,2	2.818.626,3
Pintura y limpieza	313.180,7	2.505.445,6
Suma de material y mano de obra		97.264.178,7
Gastos Generales		29.179.253,62
Total Costo de Construcción		126.443.432,4
Honorarios de Ingeniería (10% del total de costo de construcción)		12.644.343,24
Pagos por contingencia (10% del total de costo de construcción)		12.644.343,24
Inversión Total		180.911.372,5

Fuente: Elaboración propia en base a (Happel & Jordan , 1981).

En la tabla 6.1 se determinó que la inversión total del proyecto será de 181 [MM\$u\$]. El Anexo C es una descripción de cómo se determinó los costes de los equipos, costos de instalación.

6.2. COSTO DE PRODUCCIÓN

La determinación del costo de producción es muy importante en el proyecto porque según a este coste podemos analizar de manera más directa si podemos invertir en el proyecto, si se tiene un costo de producción mayor que el costo del ingreso bruto tendríamos un proyecto no factible sin analizar las demás variables económicas, por esta razón es importante la determinación de este valor.

Tabla 6.2: Costo total de producción en el proceso de producción de 1,3-butadieno.

Concepto	Costo [\$us]
Costo de materia prima	74.276.040
Costo de mano de obra	2.743.392
Costo de servicios auxiliares	926.184,4
Costos indirectos	3.429.240
Gastos generales	1.810.000
Total	83.184.856,4

Fuente: Elaboración propia en base a (Happel & Jordan , 1981).

6.3. FLUJO DE CAJA

El flujo de caja es uno de los elementos más importantes en el proyecto, ya que su evaluación del mismo se efectuará sobre los resultados que en ella se determinen. (Sapag Chain & Sapag Chain , 1991). También se lo entiende como la acumulación neta de activos liquidez en un periodo, es uno de los indicadores más importante de la liquidez del proyecto.

Para la elaboración de flujo de caja utilizaremos una planilla de cálculo, la fórmula para la determinación del flujo de caja la determinaremos con los siguientes pasos.

Paso 1, en este paso se determina el ingreso en bruto, en palabras más sencillas el ingreso por la venta del 1,3-butadieno.

$$\text{Ingreso bruto} = \text{Costo del 1,3 – butadieno} \left[\frac{\$u\$}{\text{ton}} \right] * \text{Cantidad} \left[\frac{\text{ton}}{\text{año}} \right] \quad (6.1)$$

El precio del butadieno actualmente es de 1.600 [\$u\$/ton].

Paso 2, en este paso determinamos el costo de transporte anual, que se encuentra en el Anexo C.

Paso 3, en este paso se calculará la utilidad bruta.

$$\text{Utilidad bruta} = \text{Ingreso bruto} - \text{Costo de producción} - \text{Costo de transporte} \quad (6.2)$$

Paso 4, en este paso se calculará las regalías, las regalías son el 1% de la utilidad bruta.

$$\text{Regalías} = 1\% * \text{Utilidad bruta} \quad (6.3)$$

Paso 5, en este paso se calculará los impuestos, los impuestos que se debe pagar son el 25% de la utilidad bruta.

$$\text{Impuestos} = 25\% * \text{Utilidad bruta} \quad (6.4)$$

Paso 6, se determina la utilidad neta.

$$\text{Utilidad neta} = \text{Utilidad bruta} - \text{Impuestos} - \text{Regalías} \quad (6.5)$$

Paso 7, se determina la reserva legal, la cual es el 10% de la utilidad neta del año anterior.

$$\text{Reserva legal} = 10\% * \text{Utilidad neta} \quad (6.6)$$

Paso 8, se termina el flujo de caja neto

$$\text{Flujo de caja neto} = \text{Utilidad neta} - \text{Reserva legal} \quad (6.7)$$

Paso 9, se determina el flujo de caja acumulado

En el primer año se calcula con la siguiente formula:

$$\text{Flujo de caja acumulado} = \text{Flujo de caja neto} - \text{Inversión} \quad (6.8)$$

A partir del segundo año se calcula con la siguiente formula:

$$\text{Flujo de caja acumulado} = \text{Flujo de caja neto} + \text{Flujo de caja(año anterior)} \quad (6.9)$$

Con todos los pasos descritos anteriormente procedemos a elaborar la tabla 6.3, el flujo de caja será elaborado para los próximos 20 años.

Tabla 6.3: Flujo de caja.

Año	Ingreso bruto [\$u\$]	Costo de producción [\$u\$]	Costo de transporte [\$u\$]	Utilidad bruta [\$u\$]	Impuestos [\$u\$]	Regalías [\$u\$]	Utilidad Neta [\$u\$]	Reserva Legal [\$u\$]	Flujo de caja neto [\$u\$]	Flujo de caja acumulado [\$u\$]
1	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	-136.433.397
2	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	-91.866.794,1
3	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	-47.300.191,2
4	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	-2.733.588,22
5	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	41.833.014,7
6	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	86.399.617,7
7	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	130.966.221
8	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	175.532.824
9	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	220.099.427
10	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	264.666.029
11	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	309.232.632
12	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	353.799.235
13	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	398.365.838
14	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	442.932.441
15	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	487.499.044
16	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	532.065.647
17	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	576.632.250
18	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	621.198.853
19	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	665.765.456
20	147.308.160	83.184.856,4	728.420,32	63.394.883,28	15.848.720,8	633.948,833	46.912.213,63	2345.610,68	44.566.602,9	710.332.059

Fuente: Elaboración propia en base a (Happel & Jordan , 1981).

6.3.1. El valor actual neto

El valor actual neto es también conocido como valor actualizado neto, la metodología consiste en descontar al momento de actuar todos los flujos de caja en futuros, como objetivo principal nos ayuda a determinar la viabilidad del proyecto. (Sapag Chain & Sapag Chain , 1991)

El VAN se puede calcular mediante la ecuación (6.10):

$$VAN = \sum_{t=1}^n \frac{F_t}{(1+i)^t} - I \quad (6.10)$$

Donde:

- F_t : Flujo de caja en el periodo t.
- N: Numero de periodos.
- I: La inversión en el proyecto.
- i: Es el tipo de interés.

Con un interés al 9% se tiene un valor del VAN por un periodo de 20 [años], reemplazando en la ecuación (6.10).

$$VAN = \left[\frac{-136.433.397}{(1+0,09)^1} + \frac{-91.866.794,1}{(1+0,09)^2} + \frac{-47.300.191,2}{(1+0,09)^3} + \frac{-2.733.588,22}{(1+0,09)^4} + \frac{41.833.014,7}{(1+0,09)^5} \right. \\ + \frac{86.399.617,7}{(1+0,09)^6} + \frac{130.966.221}{(1+0,09)^7} + \frac{175.532.824}{(1+0,09)^8} + \frac{220.099.427}{(1+0,09)^9} + \frac{264.666.029}{(1+0,09)^{10}} \\ + \frac{309.232.632}{(1+0,09)^{11}} + \frac{353.799.235}{(1+0,09)^{12}} + \frac{398.365.838}{(1+0,09)^{13}} + \frac{442.932.441}{(1+0,09)^{14}} + \frac{487.499.044}{(1+0,09)^{15}} \\ + \frac{532.065.647}{(1+0,09)^{16}} + \frac{576.632.250}{(1+0,09)^{17}} + \frac{621.198.853}{(1+0,09)^{18}} + \frac{665.765.456}{(1+0,09)^{19}} + \frac{710.332.059}{(1+0,09)^{20}} \\ \left. - 181.000.000 \right] [\$U\$]$$

$$VAN = 1.326,8 \text{ [MM\$U\$]}$$

Debido a que el valor obtenido del VAN es mayor a cero se puede implementar la planta de 1,3-butadieno por que la inversión producirá ganancias por encima de la rentabilidad exigida.

6.3.2. Tasa interna de retorno

La tasa interna de retorno de la inversión se utiliza como indicador de la rentabilidad del proyecto bajo los siguientes criterios:

- TIR > Tasa de oportunidad, es un proyecto factible.
- TIR < Tasa de oportunidad, es un proyecto no factible.
- TIR = Tasa de oportunidad, es un proyecto indiferente.

La tasa interna de retorno se calcula con la ecuación (6.11), donde el valor actual neto es cero:

$$\sum_{t=1}^n \frac{F_t}{(1 + TIR)^t} - I = 0 \quad (6.11)$$

Donde:

- F_t : Flujo de caja en el periodo t.
- N: Numero de periodos.
- I: La inversión en el proyecto.

Reemplazando datos en la ecuación 6.11.

$$\left[\frac{-136.433.397}{(1 + TIR)^1} + \frac{-91.866.794,1}{(1 + TIR)^2} + \frac{-47.300.191,2}{(1 + TIR)^3} + \frac{-2.733.588,22}{(1 + TIR)^4} + \frac{41.833.014,7}{(1 + TIR)^5} \right. \\ \left. + \frac{86.399.617,7}{(1 + TIR)^6} + \frac{130.966.221}{(1 + TIR)^7} + \frac{175.532.824}{(1 + TIR)^8} + \frac{220.099.427}{(1 + TIR)^9} + \frac{264.666.029}{(1 + TIR)^{10}} \right. \\ \left. + \frac{309.232.632}{(1 + TIR)^{11}} + \frac{353.799.235}{(1 + TIR)^{12}} + \frac{398.365.838}{(1 + TIR)^{13}} + \frac{442.932.441}{(1 + TIR)^{14}} + \frac{487.499.044}{(1 + TIR)^{15}} \right. \\ \left. + \frac{532.065.647}{(1 + TIR)^{16}} + \frac{576.632.250}{(1 + TIR)^{17}} + \frac{621.198.853}{(1 + TIR)^{18}} + \frac{665.765.456}{(1 + TIR)^{19}} + \frac{710.332.059}{(1 + TIR)^{20}} \right. \\ \left. - 181.000.000 \right] [\text{\$}] = 0$$

$$\mathbf{TIR = 23,08\%}$$

Debido a que la tasa interna de retorno es mayor a la tasa de oportunidad, lo cual nos indica que tenemos un proyecto factible.

6.3.3. Payback

También es denominado plazo de recuperación, no indica el periodo de tiempo para recuperar la inversión del proyecto.

Una de sus principales ventajas es que tiene su fácil calculo, aunque sus desventajas son que no toma el valor del dinero en el tiempo y tampoco si el proyecto es rentable. Con la ecuación 6.12 determinaremos el payback.

$$\text{Payback} = T_i + \frac{|\text{Flujo de caja acumulado}_i|}{\text{Flujo de caja neto}_{i+1}} \quad (6.12)$$

Donde:

- T_i : El periodo i .
- i : es el valor en el periodo.
- $i+1$: Es el valor en un periodo posterior al periodo i .

Analizando la tabla 6.3, determinamos los datos necesarios para determinar el payback entre cuarto y quinto el periodo, entonces los datos son:

- $T_i = 4$ [años]
- Flujo de caja acumulado $_i = -2.733.588,1$ [\$\$]
- Flujo de caja neto $_{i+1} = 44.566.602,9$ [\$\$]

Reemplazando datos en la ecuación 6.12 se tiene:

$$\text{Payback} = 4[\text{años}] + \frac{|-2.733.588,1|}{44.566.602,9} [\text{años}]$$

$$\text{Payback} = 4[\text{años}] + 22,4 [\text{días}]$$

En los resultados del análisis económico se obtuvo el valor actual neto para un periodo de 20 años de 1.326,8 [MM\$\$], tasa interna de retorno igual a 23,08% y el último análisis que se hizo fue del plazo de recuperación igual a 4 años con 22,4 días, lo cual nos indica que la inversión de 181 [MM\$\$] generada ganancia por encima de la rentabilidad exigida.

En el análisis económico se tuvo una inversión de 181 [MM\$\$], el método de J. Happel fue un método muy efectivo debido a que fue muy aproximado al costo de inversión que se realizó en Brasil por la empresa Braskem para la producción de 100 [kton/año] con una inversión de 180 [MM\$]. tenemos un proyecto factible y además que en un tiempo menor a 5 años aproximadamente se podrá recuperar la inversión del proyecto.

CAPÍTULO VII

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

7. 1. CONCLUSIONES

- El estudio de mercado realizado fue un factor importante al determinar la viabilidad de exportar 1,3-butadieno al mercado asiático, debido al crecimiento de la demanda de este producto, en los próximos años la implementación de esta planta puede generar grandes cantidades de dinero por conceptos de dar mayor valor agregado al n-butano.
- El proyecto tiene oportunidades en la exportación de 1,3-butadieno, el mercado de este producto está en crecimiento, y la fortaleza de integración en la industria petroquímica, innovando la tecnología con la que contamos en el país y ello nos ayuda a generar la confianza en nuestro cliente potencial el cual es China.
- La ubicación del proyecto es favorable debido a la cercanía a la fuente de suministro de materia prima, con proyectos futuros se formará un complejo petroquímico en el sector ayudando al desarrollo económico del país.
- El proceso seleccionado para producir este producto fue el O-X-D, debido a sus mayores ventajas se encuentra el mayor rendimiento y la mayor selectividad en el proceso la producción de 1,3-butadieno y el catalizador que en el reactor será O-V-Mg el cual es favorable para lograr una máxima conversión en el proceso del 60%.
- En el proceso es muy importante la remoción del dióxido de carbono, por esta razón que tenemos una etapa de remoción del dióxido de carbono, mediante un proceso de absorción con el solvente DEA que removi6 la cantidad y dejando en la corriente de butanos una cantidad mínima a que tenía la corriente después de la salida del reactor.
- Realizamos la comparación en el diseño del reactor de deshidrogenación de n-butano de manera analítica y mediante el simulador Aspen Hysys v 8.8, obteniéndose diferencias mínimas, la razón es el paquete de fluidos que considera el simulador el cual es el de Peng-Robinson mientras que en el diseño analítico se consideró condiciones ideales.
- El proyecto es factible para su implementación en nuestro país, el estudio económico lo demostró con el flujo de caja, el VAN y la tasa interna de retorno, estas variables económicas nos indica que el proyecto será viable generando ganancias y siendo rentable, con la variable económica payback estimo que el proyecto recuperada la inversión en un tiempo menor a 5 años.

7.2. RECOMENDACIONES

- En el estudio de mercado se tiene debilidades importantes por lo cual se debe cambiar en un futuro la legislación de nuestro país para que Bolivia sea un atractivo en la inversión de inversionistas, se debe ir proponiendo implementación de nuevas plantas para tener una variedad de productos en oferta y lograr tener acuerdos de venta con otras regiones.
- Se recomienda crear rutas directas para ampliar la exportación de los productos desde el Chaco, debido a que la mayor materia prima se encuentra en el departamento de Tarija y es una debilidad ante la competencia regional en la oferta de 1,3-butadieno.
- En el presente proyecto no se pudo realizar un análisis de manera más profunda debido a la limitación en variables según la patente y los datos disponibles. Si se quiere realizar más la optimización en la producción de este compuesto se debe usar en el diseño programas adicionales además del Aspen Hysys.
- La deshidrogenación oxidativa del n-butano con oxígeno tiende a producir no solamente una reacción, sino que se tiene reacciones secundarias, como se pudo evidenciar en la simulación la producción de 1-buteno y dióxido de carbono, es por esa razón que en la simulación del proceso se tiene una segunda etapa de deshidrogenación de 1-buteno.
- La inversión en este proyecto es elevada, porque se tiene diferentes etapas y se estima que en los próximos años el precio de este producto aumente debido a distintos factores en la demanda y políticos, uno de ellos es que en muchos lugares del mundo la producción de 1,3-butadieno es subproducto de la producción de polietileno y etileno,
- Se recomienda a la Carrera la implementación de convenios con la carrera de Ingeniería Química para que el estudiante pueda capacitarse en materias como Reactores Químicos, con el objetivo de realizar investigación, el país necesita más investigadores para mejorar el futuro de la industria Petroquímica en Bolivia.

BIBLIOGRAFÍA

- /1/. Ahn, C., et al. (2020). Ethanol conversion into 1,3-butadiene over ZnZr mixed oxide catalysts supported on ordered mesoporous materials. *Fuel Processing Technology*, 200, 380.
- /2/. American' Chemistry Council. (2019). The Butadiene Product Stewardship Guidance Manual. *American' Chemistry Council*, 63.
- /3/. Armas Marin, N. (2004). Deshidrogenacion Oxidativa de Alcanos Ligeros. (*Tesis Docotral*). Universitat Politecnica de Catalunya, España.
- /4/. Backes, D. (2011). Analise e Perspectivas de Mercado do Butadieno. (*Diplomacao em Engenharia Quimica*). Universidade Feredal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.
- /5/. Beliczky, L. S., & Fajen, J. (1998). Industria del caucho. *Industrias quimicas*, 80.9.
- /6/. Bisson, M., et al. (2019). Fiche de données tox icologiques et envi ronnementales des subs tances chimiques. *I N E R I S*, 1(3), 53.
- /7/. Bocanegra, S. A. (2009). Catalizadores Multimetalicos Soportados en Espinelas Para la Obtencion de Olefinas a Partir de Parafinas Livianas. (*Tesis Doctoral*). Universidad Nacional de Litoral, Santa Fe.
- /8/. Bohner, G., et al. (2007). *United States Patente n° 7226527*.
- /9/. Caicedo Realpe, M. D. (2008). *Valoracion economica del pentano mediante Deshidrogenacion Oxidativa*. Medellin.
- /10/. Cheng, L., et al. (2020). Synthesis of 1,3-butadiene from ethanol/acetaldehyde over ZrO₂-MgO-SiO₂ catalyst: The thermodynamics and reaction kinetics analysis. *Chemical Engineering Journal*, 70.
- /11/. Cote, L. L., & Bayard, S. P. (1990). Cancer Risk Assessment of 1 ,3-Butadiene. *Environmental Health Perspectives*, 86, 5.
- /12/. Coulson, J. M., & Richardson, J. F. (1984). *Diseño de reactores quimicos, Ingenieria de la reaccion bioquimica control y Metodos de calculo con ordenadores*. Barcelona-Bogota-Buenos Aires-Caracas-Mexico: Reverte.

- /13/. Curren, K. C., et al. (2006). Ambient air 1,3-butadiene concentrations in Canada (1995–2003): seasonal, day of week variations, trends, and source influences. *Atmospheric Environment*, 40(1), 170.
- /14/. Del Campo Lopez, E. M. (2015). Cinetica y Catalisis. (*Material de Aula*). Universidad Autonoma del Estado de Mexico, Ciudad de Mexico.
- /15/. Desarrollo, B. I. (1973). Material Didactico I. *Ciclo de Adiestraamiento en Preparacion y Evaluacion de Proyectos de Desarrollo Agricola*. Instituto Interamericano de Ciencias Agricolas de la OEA, San Jose.
- /16/. Diaz Velasquez, J. d., et al. (2001). Deshidrogenacion Oxidativa de Isobutano. *Revista de Ingenieria e Investigacion*, 2.
- /17/. Domenico D'Elia. (2018). Manual de Tecnologia. *Air Liquide Engineering & Construction*, 56.
- /18/. Douglas, B. E., McDaniel, D. H., & Alexander, J. J. (1994). Conceptos y Modelos de Quimica Inorganica. Barcelona: Reverte S.A.
- /19/. Doyle, M., et al. (Agosto de 2004). Effects of 1,3-Butadiene, Isoprene, and Their Photochemical Degradation. *Environmental Health Perspectives*, 112(15).
- /20/. Eiroa Matinez, J. L. (2008). *Industria Petrolquimica*. España: Universidad de Las Palmas de Gran Canaria.
- /21/. Fivizzani, K. P. (2002). *Seguridad en los Laboratorios Quimicos Academicos* (Vol. 1). (S. A. Quimica, Ed.) Nueva York: Sociedad Americana de Química.
- /22/. Fogler, H. S. (2001). *Elementos de Ingenieria de las Reacciones Quimicas* (Tercera ed.). Mexico: Pearson Educacion.
- /23/. Fonseca Gonzales, Lidiette; Berrocal Barrantes, Lorena. (2004). *Cinetica Quimica Aplicada*. San Jose: Universidad de Costa Rica.
- /24/. Fuentes, S., & Diaz, G. (2016). Catalizadores. (F. d. Economica, Ed.) *La ciencia es para todos*, 93.
- /25/. Grub, J., & Loser, E. (2012). Butadiene. *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, 70.

- /26/. Happel, J., & Jordan, D. G. (1981). *Economía de procesos Químicos*. Madrid, España: Reverte.
- /27/. Hernandez, C., & Jimenez, J. (2014). *Situación del Sector Hidrocarburos en Bolivia*, 30.
- /28/. Housan, B., & Bellagi, A. (January de 2013). Simulation of the separation of Industrially Important Hydrocarbon Mixtures by Different Distillation Techniques Using Mathematica. (E. Fermi, & A. Lamberti, Edits.) *Nova Science Publishers*, 33.
- /29/. Iffländer, K., et al. (25 de July de 2020). Dehydrogenation of 1-butene with CO₂ over VO_x supported catalysts. *Applied Catalysis A*, 602, 60.
- /30/. Institute for Health and Consumer Protection. (2002). 1,3-butadiene. *European Chemicals Bureau*, 204.
- /31/. Kuhn, K. Q., & Wassel, R. A. (1986). *Memorandum to the Butadiene Source Category Concurrence File concerning "Estimates of 1,3-Butadiene Emissions from Production Facilities and Emissions Reductions Achievable with Additional Controls,"*.
- /32/. Lee, J. K., et al. (25 de May de 2012). Oxidative dehydrogenation of n-butane to n-butene and 1,3-butadiene over Mg₃(VO₄)₂/MgO–ZrO₂ catalysts. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 18(3), 1196.
- /33/. Liu, C., et al. (2020). Synthesis of 1,3-butadiene from ethanol/acetaldehyde over ZrO₂-MgO-SiO₂ catalyst: The thermodynamics and reaction kinetics analysis. *Chemical Engineering Journal*, 400.
- /34/. Loh, M. M., Levy, J. L., Spengler, J. D., Houseman, E., & Bennett, D. H. (August de 2007). Ranking Cancer Risks of Organic Hazardous Air Pollutants in the United States. *Environmental Health Perspectives*, 115(8), 9.
- /35/. Mayer, L. (1987). *Verfahren Der Chemie Industrie*. En G. Westermann Verlag, *Metodos de la Industria Química* (pág. 65). Barcelona-Bogota-Buenos Aires-Caracas-Mexico: Reverte S.A.
- /36/. Melnick, R. L., Shackelford, C. C., & Huff, J. (1993). Carcinogenicity of 1,3-Butadiene. *Environmental Health Perspectives*, 100, 10.
- /37/. Mendoca Pompei, L. (2016). *Estudo de Sistema de Absorcao de 1,3-butadieno en NMP. (Mestre em Ciencias)*. Escola Politécnica, São Paulo.

- /38/. Miller, L. M. (December de 1978). Butadiene and Its Oligomers. *Investigation of Selected Potencial Enviromental contaminants*, 194.
- /39/. Ministerio de Desarrollo Sostenible y Planificación. (2020, 05 de Agosto). *Reglamento Ambiental del Sector Industrial Manufacturero (RASIM)*. Gaceta Oficial.
- /40/. Molinos , S., Abrego, M., & Ruiz, P. (2010). *Equipos de Proteccion Personal*.
- /41/ . Monco Martinez, G. (1990). *Conversión de butenos y fracciones c4 en hidrocarburos líquidos sobre zeolitas zsm-5*. Madrid.
- /42/. Morrow, N. L. (1990). The Industrial Production and Use of. *Environmental Health Perspectives*, 86, 7-8.
- /43/. Owen, O. S., & Kung, H. H. (1993). Effect of cation reducibility on oxidative dehydrogenation of butane on orthovanadates. *Journal of Molecular Catalysis*, 265-284.
- /44/. Park, R. M., et al. (Noviembre de 2003). Butadiene Epidemiology Re-Interpreted, Again. *Epidemiology*, 4(6), 559-561.
- /45/. Ponce Talancon, H. (Septiembre de 2006). La matriz FODA: una alternativa para realizar diagnósticos y determinar estrategias de intervención en las organizaciones. *Contribuciones a la Economía*, 16.
- /46/. Primo Yurifera, E. (1996). Química Organica Basica y Aplicada. En E. Primo Yurifera, *Química Organica Basica y Aplicada* (pág. 147). Barcelona: Reverte S.A.
- /47/. Santamaria, J., Herguido, J., Menendez, M. A., & Monzon, A. (1999). *Ingeniería de Reactores*. Síntesis.
- /48/. Sapag Chain , N., Sapag Chain, R., & Sapag Puelma, J. M. (2008). *Preparacion y Evaluacion de Proyectos* (Sexta ed.). Mexico-Bogota-Buenos Aires-Caracas-Guatemala-Madrid-Nueva York: McGraw-Hill Education.
- /49/. Sapag Chain, N., & Sapag Chain , R. (1991). *Preparacion y Evaluacion de Proyectos* (Segunda ed.). Ciudad de Mexico: McGraw-Hill.
- /50/. Tanimu, G., et al. (Junio de 2020). Oxidative dehydrogenation of n-butane to butadiene catalyzed by new mesoporous mixed oxides NiO-(beta-Bi2O3)-Bi2SiO5/SBA-15. *Molecular Catalysis*, 448, 60.

- /51/. Toledo Antonio, J. A. (1998). Sustitucion de Fe³⁺ por Al³⁺ en la ferrita zinc. (*Tesis Doctoral*). Universidad Autonoma Metropolitana, Ciudad de Mexico.
- /52/. Towler, G., & Sinnott, R. (1999). *Chemical Engineering Design-Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design* (Second ed.). Amsterdam: Reverte.
- /53/. Weissermel, K., & Arpe, H.-J. (1981). *Quimica organica industrial*. España: Reverte, S. A.
- /54/. White, C. (2007). Butadiene production process overview. *Chemico-Biological Interactions*, 166(1-3), 5.
- /55/. Zhang, H., et al. (2020). Factors influencing 1,3-butadiene formation for light alkane dehydrogenation. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 113, 189-197.
- /56/. Zhu, Y., & Zhou, C.-W. (November de 2020). Chemical kinetics study of 1,3-butadiene + H₂O₂; implications for combustion modeling and simulation. *Combustion and Flame*, 221, 552.

Anexo A

Simulación con el Software Aspen Hysys v 8.8 para una planta de 1,3-butadieno

Se definirá la lista de componentes, debido a que se tiene un componente ácido se elegirá dos listas de componentes diferentes.

Primera lista de componentes.

Figura A.1: Definición de Componentes.

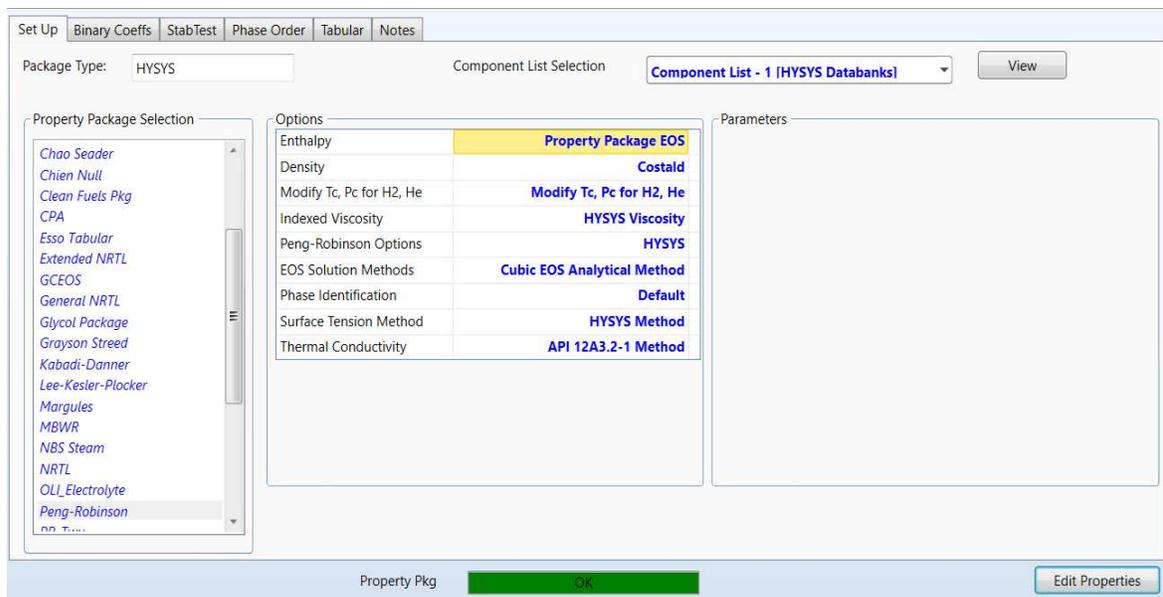
Source Databank: HYSYS

Component	Type	Group
n-Butane	Pure Component	
1-Butene	Pure Component	
1,3-Butadiene	Pure Component	
Oxygen	Pure Component	
H2O	Pure Component	
CO2	Pure Component	
Furfural	Pure Component	

Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

El paquete de fluidos de la primera lista de componentes.

Figura A.2: Selección del paquete de fluidos.



Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

La segunda lista de componentes será:

Figura A.3: Lista de componentes.

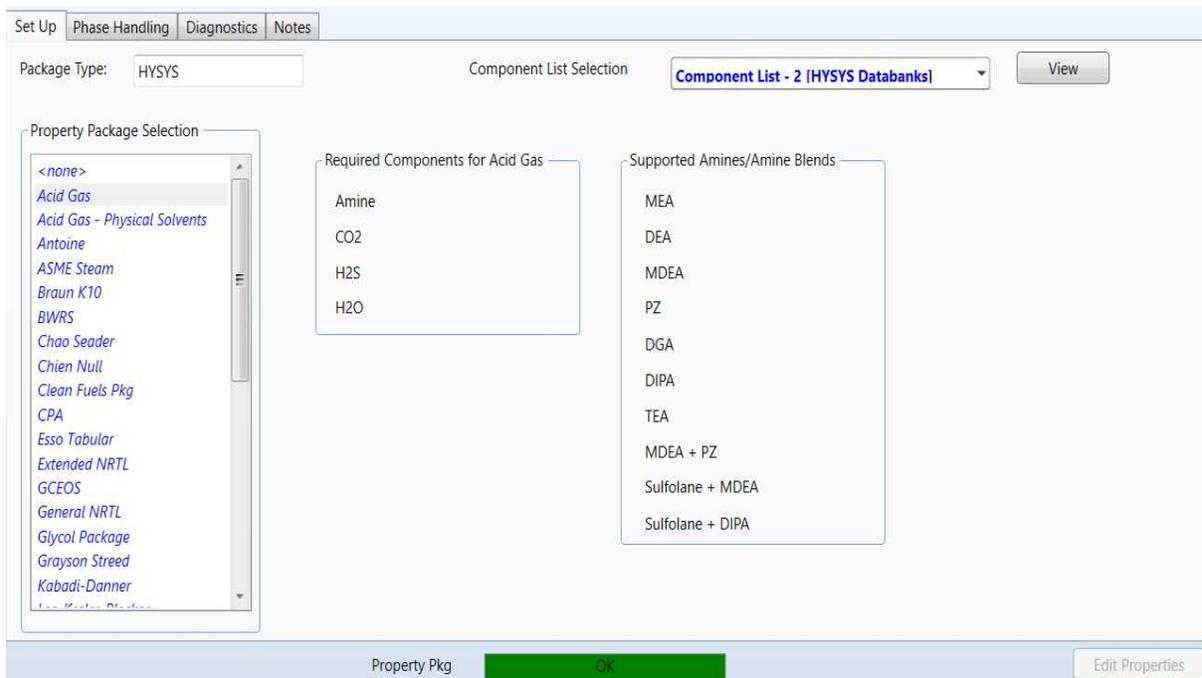
Source Databank: HYSYS

Component	Type	Group
n-Butane	Pure Component	
1-Butene	Pure Component	
1,3-Butadiene	Pure Component	
H2O	Pure Component	
CO2	Pure Component	
H2S	Pure Component	
DEAmine	Pure Component	

Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

Selección del paquete de fluidos.

Figura A.4: Selección del paquete de fluidos.



Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

Caracterización de las reacciones en el primer reactor.

Figura A.5: Reacción a 1,3-butadieno.

Component	Mole Wt.	Stoich Coeff	Fwd Order	Rev Order
n-Butane	58,124	-1,000	1,00	0,00
Oxygen	32,000	-1,000	1,00	0,00
13-Butadiene	54,092	1,000	0,00	1,00
H2O	18,015	2,000	0,00	2,00
Add Comp				

Balance Error	0,00000
Reaction Heat (25 C)	-2,5e+05 kJ/kgmole

Basis	Partial Pres
Base Component	n-Butane
Rxn Phase	VapourPhase
Min. Temperature	25,00 C
Max Temperature	2000 C

Basis Units: Pa
Rate Units: kamole/m3-s

Forward Reaction		Reverse Reaction	
A	14,500	A'	<empty>
E	1,6230e+005	E'	<empty>
b	<empty>	b'	<empty>

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

Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

Figura A.6: Reacción a 1-buteno.

Component	Mole Wt.	Stoich Coeff	Fwd Order	Rev Order
n-Butane	58,124	-1,000	1,00	0,00
Oxygen	32,000	-0,500	0,50	0,00
1-Butene	56,108	1,000	0,00	1,00
H2O	18,015	1,000	0,00	1,00
Add Comp				

Balance Error	0,00000
Reaction Heat (25 C)	-1,2e+05 kJ/kgmole

Basis	Partial Pres
Base Component	n-Butane
Rxn Phase	VapourPhase
Min. Temperature	25,00 C
Max Temperature	3000 C

Basis Units: Pa
Rate Units: kamole/m3-s

Forward Reaction		Reverse Reaction	
A	1,5000	A'	<empty>
E	1,4650e+005	E'	<empty>
b	<empty>	b'	<empty>

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

Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

Figura A.7: Reacción a Dióxido de Carbono.

Stoichiometry and Rate Info

Component	Mole Wt.	Stoich Coeff	Fwd Order	Rev Order
n-Butane	58,124	-1,000	1,00	0,00
Oxygen	32,000	-6,500	6,50	0,00
CO2	44,010	4,000	0,00	4,00
H2O	18,015	5,000	0,00	5,00
Add Comp				

Basis

Basis: Partial Pres
 Base Component: n-Butane
 Rxn Phase: VapourPhase
 Min. Temperature: 25,00 C
 Max Temperature: 2000 C

Basis Units: Pa
 Rate Units: kmole/m3-s

Forward Reaction

A	2,0000e-002
E	1,2150e+005
b	<empty>

Reverse Reaction

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

Equation Help

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

Balance Error: 0,00000
 Reaction Heat (25 C): -2,7e+06 kJ/kgmole

Ready

Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

Reacciones en el segundo reactor.

Figura A.8: Reacción de 1-buteno a 1,3-butadieno

Stoichiometry and Rate Info

Component	Mole Wt.	Stoich Coeff	Fwd Order	Rev Order
1-Butene	56,108	-1,000	1,00	0,00
Oxygen	32,000	-0,500	0,50	0,00
13-Butadiene	54,092	1,000	0,00	1,00
H2O	18,015	1,000	0,00	1,00
Add Comp				

Basis

Basis: Partial Pres
 Base Component: 1-Butene
 Rxn Phase: VapourPhase
 Min. Temperature: 25,00 C
 Max Temperature: 3000 C

Basis Units: Pa
 Rate Units: kmole/m3-s

Forward Reaction

A	4500,0
E	1,3500e+005
b	<empty>

Reverse Reaction

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

Equation Help

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

Balance Error: 0,00000
 Reaction Heat (25 C): <empty>

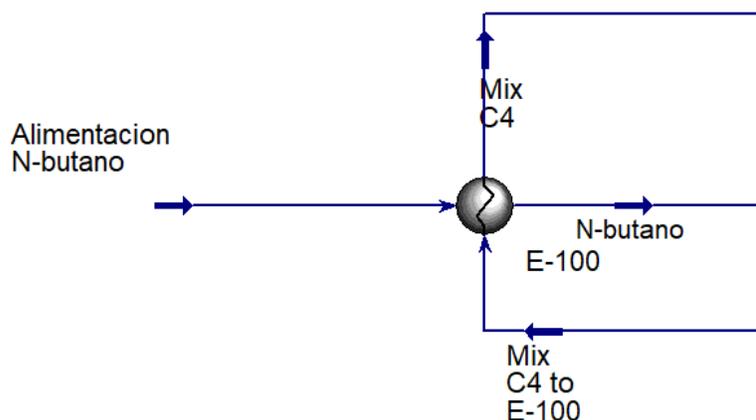
Ready

Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

Una vez definiendo las propiedades pasamos a realizar la simulación.

La alimentación de n-butano ingresa a un intercambiador de calor para elevar su temperatura a la requerida para ingresar al reactor.

Figura A.9: Intercambiador de calor E-100.



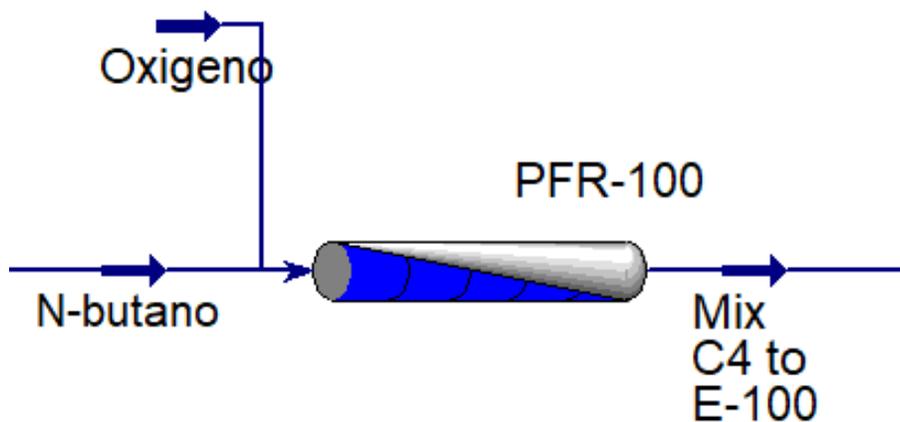
Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

Tabla A.1: Parámetros en el intercambiador de calor.

Corriente	N-butano	Mix C4 to E-100	Alimentación N-butano	Mix C4
Fracción de vapor	1	1	1	1
Temperatura [C]	500	1.235,091	25	972,876
Presión [kPa]	20	20	20	20
Flujo molar [kgmole/h]	237	606,127	237	606,127
Flujo masico [kg/h]	13.775,39	19.855,00	13.775,39	19.855,00
Flujo volumetrico [m3/h]	23,620	28,294	23,619	28,294
Flujo de calor [kJ/h]	-12.715.107,60	-1,3E+07	-3E+07	-3E+07

Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

Figura A.10: Reactor de deshidrogenacion oxidativa de n-butano (PFR-100)



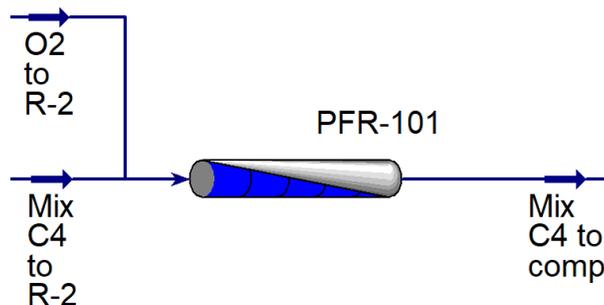
Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

Tabla A.2: Balance de Materia en el reactor de deshidrogenacion oxidativa.

Corriente	N-butano	Oxigeno	Mix C4 to E-100
Fracción de vapor	1	1	1
n-Butano [kgmol/h]	237	0	29,93
1-Buteno [kgmol/h]	0	0	58,06
1,3-Butadieno [kgmol/h]	0	0	146,83
Oxigeno [kgmol/h]	0	190	0,00
H2O [kgmol/h]	0	0	342,60
CO2 [kgmol/h]	0	0	8,70

Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

Figura A.11: Reactor de deshidrogenacion oxidativa de n-butano (PFR-101)



Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

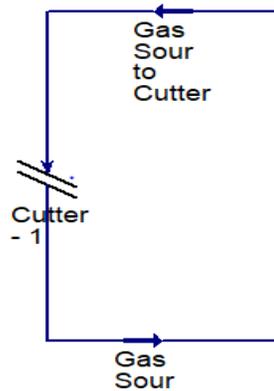
Tabla A.3: Balance de materia en el reactor de deshidrogenacion oxidativa de 1-buteno.

Corriente	Mix C4 to R-2	O2 to R-2	Mix C4 to comp
Fracción de vapor	1	1	1
n-Butano [kgmol/h]	29,93	0	29,93
1-Buteno [kgmol/h]	58,06	0	6,06
1,3-Butadieno [kgmol/h]	146,83	0	198,83
Oxigeno [kgmol/h]	0,00	26	0,00
H2O [kgmol/h]	362,60	0	414,60
CO2 [kgmol/h]	8,70	0	8,70

Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

Esta mezcla que sale de la corriente del segundo reactor se enviara a la zona de remoción de CO₂, pero como se tiene dos paquetes de fluidos diferentes, utilizaremos la opción cutter que se muestra en la siguiente figura:

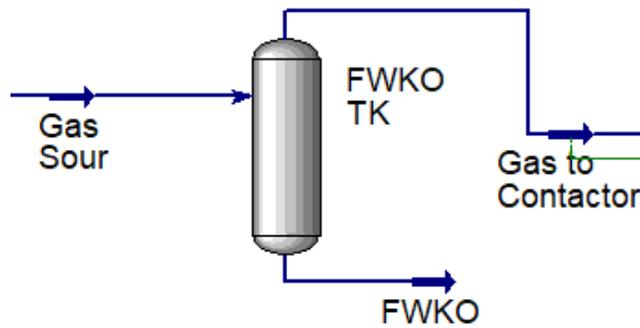
Figura A.12: Transición de paquete de fluidos.



Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

La corriente de Gas sour se lleva a un separador flash.

Figura A.13: Separador Flash.



Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

Tabla A.4: Balance de materia en el separador flash.

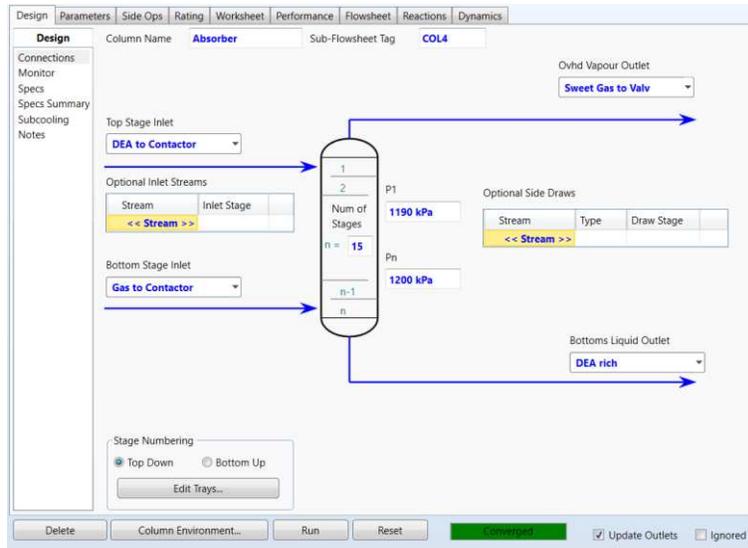
Corriente	Gas Sour	FWKO	Gas to Contactor
Fracción de vapor	0,38	0	1
n-Butano [kgmol/h]	29,93	0,00	29,93
1-Buteno [kgmol/h]	6,06	0,00	6,06
1,3-Butadieno [kgmol/h]	198,83	2,00	196,83
Oxígeno [kgmol/h]	0,00	0,00	0,00
H2O [kgmol/h]	414,60	408,47	6,13
CO2 [kgmol/h]	8,70	0,04	8,66

Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

En este separador se remueve la mayor cantidad de agua.

La corriente de gas con mínimo contenido de agua se envía a la torre con contactora para remover el CO₂.

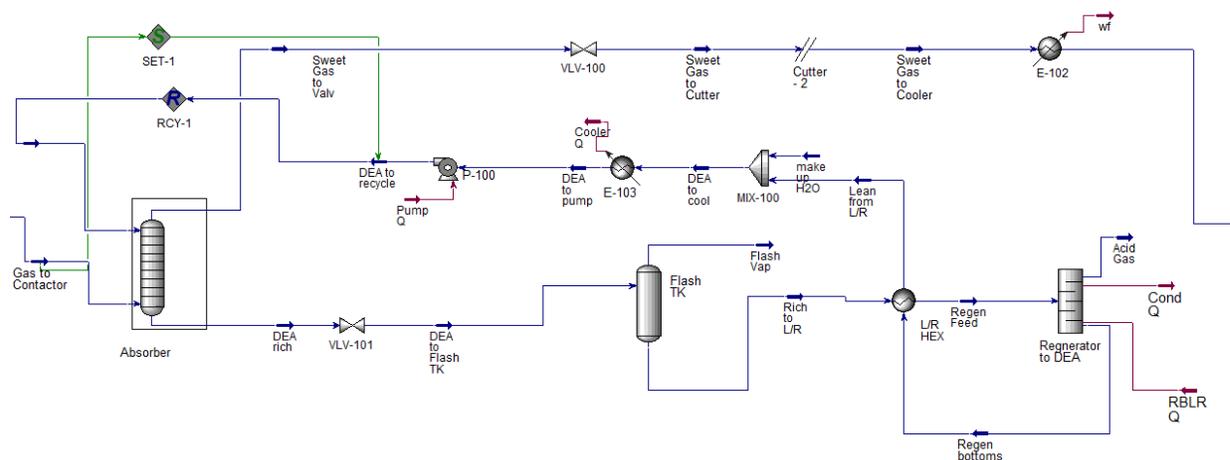
Figura A.14: Columna absorbidora.



Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

El producto de fondo debe ser regenerado para nuevamente recircular en el proceso, en la figura A.15 se observa el ciclo del DEA desde que ingresa a la columna de absorción hasta que se recupera el solvente.

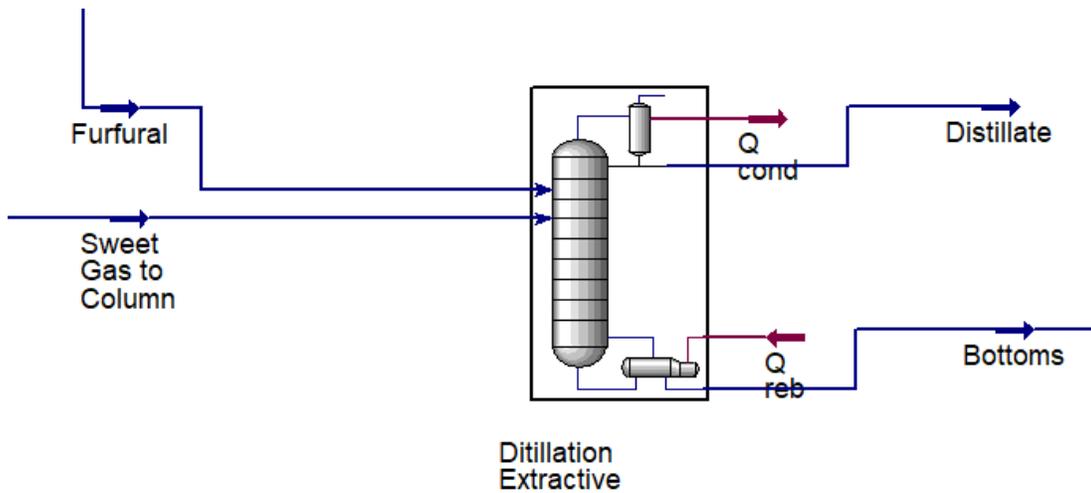
Figura A.15: Regeneración del DEA.



Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

El gas que sale de la columna de absorción tiene la mínima cantidad de CO₂, este gas se envía a una columna de destilación extractiva para recuperar el 1,3-butadieno.

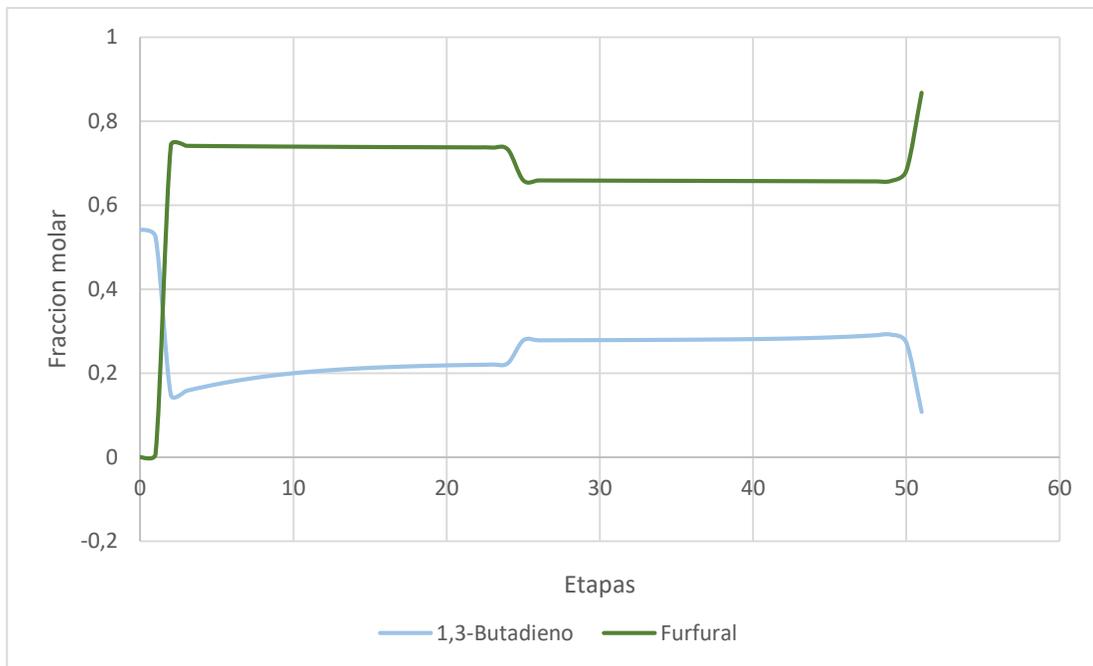
Figura A.16: Destilación extractiva.



Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

Los perfiles de composición en la columna de destilación extractiva se encuentran en la figura A.17.

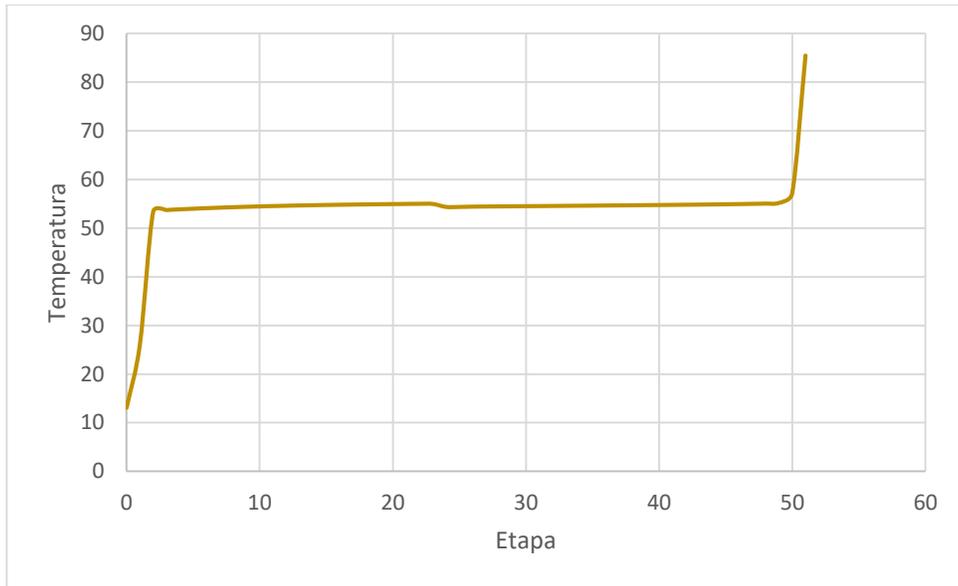
Figura A.17: Composición vs. Etapas.



Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

En la figura A.18 tenemos el perfil de temperatura a través de las etapas en la columna de destilación.

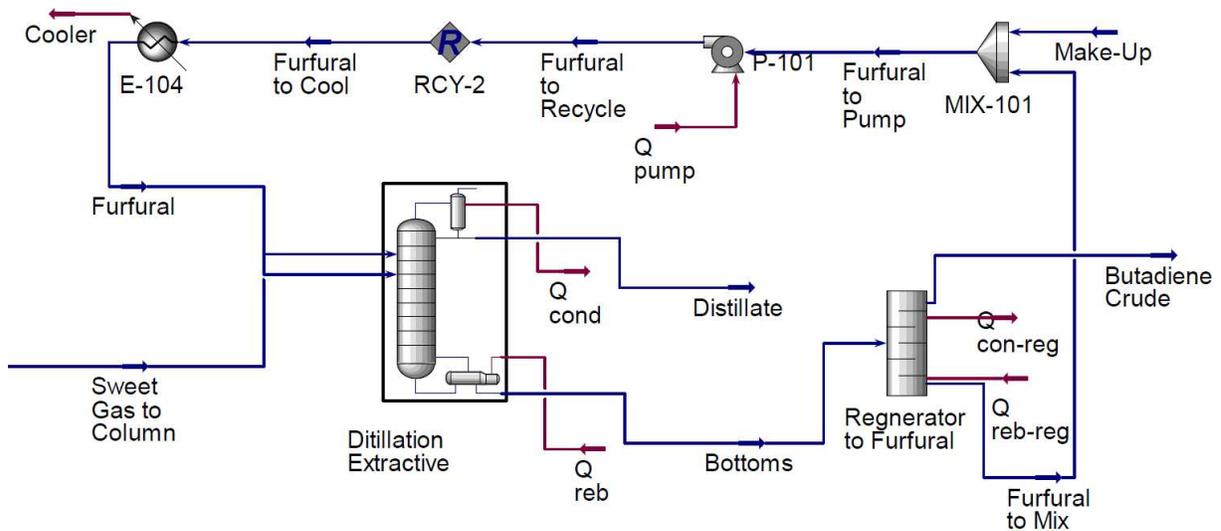
Figura A.18: Temperatura vs. Etapas.



Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

El producto de fondo está compuesto de una mezcla de 1,3-butadieno Furfural en mayor proporción. Esta mezcla se lleva a un proceso de recuperación de solvente, donde el producto de cabeza es el 1,3-butadieno y el producto de fondo es el Furfural que es recirculado nuevamente en la columna de destilación extractiva.

Figura A.17: Proceso de recuperación del solvente.



Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

En la tabla A.5 tenemos la corriente de 1,3-butadieno crudo obtenido en el simulador Aspen Hysys v 8.8.

Tabla A.5: 1,3-butadieno obtenido en la simulación.

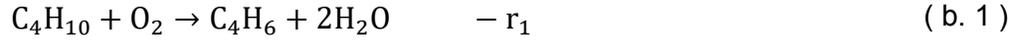
Corriente	Butadieno Crudo
Fracción de vapor	0
Temperatura [C]	12,6
Presión [kPa]	190
Flujo Masico [kgmole/h]	206,0179
Flujo Molar [kg/h]	10510,2662
Flujo de volumétrico [m3/h]	16,8458
Componente	Fracción Molar
n-Butano	0.0851
1-Butene	0.0133
1,3-Butadiene	0.9012
Oxígeno	0.0000
H2O	0.0003
CO2	0.0000
Furfufal	0.0001

Fuente: Elaboración propia en base al simulador Aspen Hysys v 8.8.

Anexo B

Diseño del reactor multitubular de lecho fijo de forma analítica

La reacción en el reactor multitubular para obtener 1,3 butadieno es la siguiente:



Donde:

- $-r_1$: velocidad de la reacción.

La velocidad de reacción se la puede expresar de la siguiente manera:

$$-r_i = k_i * P_{\text{C}_4\text{H}_{10}}^m * P_{\text{O}_2}^n \quad (\text{b. 2})$$

Donde:

- k_i : la constante cinética.
- $P_{\text{C}_4\text{H}_{10}}$: presión parcial del n-butano.
- P_{O_2} : presión parcial del oxígeno.
- m, n : constantes.

La constante cinética se la puede expresar de la siguiente manera:

$$k_i = e^{-\frac{E_{ai}}{R} * \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_m} \right]} \quad (\text{b. 3})$$

Donde:

- E_{ai} : energía de activación.
- R : constante universal de los gases.
- T : temperatura.
- T_m : temperatura.

Debido a que se tiene una reacción en la fase gaseosa y un sistema de flujo a volumen variable se tiene la siguiente ecuación:

$$v = v_0 * (1 + \varepsilon X_A) * \left(\frac{Z}{Z_0} \right) * \left(\frac{P_0}{P} \right) * \left(\frac{T}{T_0} \right) \quad (\text{b. 4})$$

Donde:

- v_0 : flujo volumétrico inicial.

- ε : el factor de expansión.
- X_A : la conversión del n-butano.
- Z_0, Z : factor de compresibilidad.
- P_0, P : presión inicial y presión final.
- T_0, T : temperatura inicial y final de la reacción.

Teniendo las consideraciones de un gas ideal, presión constante y opera el reactor adiabáticamente, la ecuación anterior se reduce a:

$$v = v_0 * (1 + \varepsilon X) * \left(\frac{T}{T_0}\right) \quad (\text{b. 5})$$

El flujo molar de n-butano será:

$$F_{C_4H_{10}} = F_{C_4H_{10_0}} * (1 - X) \quad (\text{b. 6})$$

Donde:

- $F_{C_4H_{10}}$: flujo molar después de la reacción de n-butano.
- $F_{C_4H_{10_0}}$: flujo molar de n-butano que ingresa en el reactor.
- X : conversión del n-butano.

La concentración de n-butano se determinará dividiendo la ecuación (b.5) con la ecuación (b.4):

$$\frac{F_{C_4H_{10}}}{v} = \frac{F_{C_4H_{10_0}} * (1 - X)}{v_0 * (1 + \varepsilon X) * \left(\frac{T}{T_0}\right)}$$

Realizando operaciones y ordenando la anterior ecuación se tiene:

$$C_{C_4H_{10}} = C_{C_4H_{10_0}} * \frac{1 - X}{1 + \varepsilon X} * \left(\frac{T_0}{T}\right) \quad (\text{b. 7})$$

Donde:

- $C_{C_4H_{10}}$: concentración del n-butano.
- $C_{C_4H_{10_0}}$: concentración inicial del n-butano.

El flujo molar del oxígeno será:

$$F_{O_2} = F_{O_{2_0}} - F_{C_4H_{10_0}} * X \quad (\text{b. 8})$$

Donde:

- F_{O_2} : flujo molar después de la reacción de oxígeno.
- $F_{O_{20}}$: flujo molar de oxígeno que ingresa en el reactor
- $F_{C_4H_{100}}$: flujo molar de n-butano que ingresa en el reactor.
- X : conversión del n-butano.

La concentración de oxígeno se determinará dividiendo la ecuación (b.7) con la ecuación (b.4):

$$\frac{F_{O_2}}{v} = \frac{F_{O_{20}} - F_{C_4H_{100}} * X}{v_0 * (1 + \epsilon X) * \left(\frac{T}{T_0}\right)}$$

Realizando operaciones y ordenando la anterior ecuación se tiene:

$$C_{O_2} = \left[\frac{C_{O_{20}} - C_{C_4H_{100}} * X}{1 + \epsilon X} \right] * \left(\frac{T_0}{T}\right) \quad (b.9)$$

Donde:

- C_{O_2} : concentración del oxígeno.
- $C_{C_4H_{10}}$: concentración del n-butano.
- $C_{C_4H_{100}}$: concentración inicial del n-butano.

La presión parcial del n-butano y del oxígeno, se pondrá en función de las concentraciones de ambos compuestos:

Para condiciones ideales se tiene la siguiente relación de la presión en función de la concentración:

$$P_i = C_i * R * T \quad (b.10)$$

Para el n-butano, reemplazando la ecuación (b.6) en la ecuación (b.9).

$$P_{C_4H_{10}} = C_{C_4H_{100}} * \frac{1 - X}{1 + \epsilon X} * \left(\frac{T_0}{T}\right) * R * T$$

Realizando operaciones se tiene:

$$P_{C_4H_{10}} = C_{C_4H_{100}} * \frac{1 - X}{1 + \epsilon X} * T_0 * R \quad (b.11)$$

Para el oxígeno, reemplazando la ecuación (b.8) en la ecuación (b.9).

$$P_{O_2} = \left[\frac{C_{O_{20}} - C_{C_4H_{100}} * X}{1 + \epsilon X} \right] * \left(\frac{T_0}{T}\right) * R * T$$

Realizando operaciones se tiene:

$$P_{O_2} = \left[\frac{C_{O_2} - C_{C_4H_{10}} * X}{1 + \varepsilon X} \right] * T_0 * R \quad (b. 12)$$

Para obtener la ecuación de la velocidad de reacción reemplazamos las ecuaciones (b.10) y (b.11) en la ecuación (b.1).

$$-r_i = e^{-\frac{E_{ai}}{R} * \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_m} \right]} * \left(C_{C_4H_{10}} * \frac{1 - X}{1 + \varepsilon X} * T_0 * R \right)^m * \left(\left[\frac{C_{O_2} - C_{C_4H_{10}} * X}{1 + \varepsilon X} \right] * T_0 * R \right)^n$$

Realizando operaciones se tiene la siguiente ecuación.

$$-r_i = e^{-\frac{E_{ai}}{R} * \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_m} \right]} * (T_0 * R)^{m+n} * \left(C_{C_4H_{10}} * \frac{1 - X}{1 + \varepsilon X} \right)^m * \left(\left[\frac{C_{O_2} - C_{C_4H_{10}} * X}{1 + \varepsilon X} \right] \right)^n \quad (b. 13)$$

El factor de expansión para la reacción en fase gaseosa se determina con la siguiente ecuación:

$$\varepsilon = \frac{n_{\text{prod.}} - n_{\text{react.}}}{n_{C_4H_{10}(\text{R.L.})}} * y_{C_4H_{10}O} \quad (b. 14)$$

Donde:

- $n_{\text{prod.}}$: moles estequiométricos de los productos, la suma de los coeficientes estequiométricos de los productos.
- $n_{\text{react.}}$: moles estequiométricos de los reactivos, la suma de los coeficientes estequiométricos de los reactivos.
- $n_{C_4H_{10}(\text{R.L.})}$: moles estequiométricos del reactivo limitante, coeficiente estequiométrico del reactivo limitante.
- $y_{C_4H_{10}O}$: composición inicial del reactivo limitante.

La concentración inicial del butano y oxígeno, se determina con las siguientes ecuaciones:

Para el n-butano.

$$C_{C_4H_{10}} = \frac{P_{C_4H_{10}}}{R * T_0} \quad (b. 15)$$

Donde:

- $P_{C_4H_{10}}$: presión parcial inicial del n-butano
- R : constante universal de los gases.

- T_0 : temperatura de entrada al reactor del n-butano.

Para el oxígeno.

$$C_{O_2_0} = \frac{P_{O_2_0}}{R * T_0} \quad (b. 16)$$

Donde:

- $P_{O_2_0}$: presión parcial inicial del oxígeno.
- R : constante universal de los gases.
- T_0 : temperatura de entrada al reactor del oxígeno.

La ecuación de diseño del reactor de flujo pistón:

$$F_{C_4H_{10O}} * \frac{dX}{dV} = -r_{C_4H_{10}} \quad (b. 17)$$

En su forma integral:

$$V = F_{C_4H_{10O}} \int_0^X \frac{dX}{-r_{C_4H_{10}}} \quad (b. 18)$$

Donde:

- V : volumen del reactor.
- $-r_{C_4H_{10}}$: velocidad de la reacción.

La conversión en función de la temperatura final de la reacción.

$$X = \frac{\sum \int_{T_i}^T \theta_i * C_{p_i} dT}{-\left[\Delta H_{RX}^\circ + \int_{298}^T \Delta C_P dT\right]} \quad (b. 19)$$

Donde:

- X : conversión del n-butano.
- C_{p_i} : capacidad calorífica a presión constante.
- ΔH_{RX}° : entalpía estándar de formación

La entalpía estándar de formación en la reacción se puede determinar con la siguiente ecuación:

$$\Delta H_{R_x}^{\circ} = 2 * \Delta H_{H_2O}^{\circ} + \Delta H_{C_4H_6}^{\circ} - \Delta H_{C_4H_{10}}^{\circ} - \Delta H_{O_2}^{\circ} \quad (\text{b. 20})$$

Se puede determinar ΔC_p con la siguiente ecuación.

$$\Delta C_p = \sum C_{p_{\text{productos}}} - \sum C_{p_{\text{reactivos}}} \quad (\text{b. 21})$$

El valor de θ_i se determina con la siguiente ecuación:

$$\theta_{C_4H_{10}} = 1 \quad (\text{b. 22})$$

$$\theta_{O_2} = \frac{F_{O_{20}}}{F_{C_4H_{100}}} \quad (\text{b. 23})$$

Donde:

- $F_{O_{20}}$: flujo molar del oxígeno.
- $F_{C_4H_{100}}$: flujo molar del n-butano.

Con la ecuación (b.23) se podrá determinar de una manera más sencilla la expresión

$$\sum \int_{T_i}^T \theta_i * C_{p_i} dT.$$

$$\sum \int_{T_i}^T \theta_i * C_{p_i} dT = \int_{T_i}^T (\theta_{C_4H_{10}} * C_{p_{C_4H_{10}}} + \theta_{O_2} * C_{p_{O_2}}) dT \quad (\text{b. 24})$$

Reemplazando datos se obtendrá que la velocidad de reacción se encuentra en función de la conversión del n-butano.

$$-r_i = f(X) \quad (\text{b. 25})$$

Reemplazando en la ecuación de diseño

$$V = F_{C_4H_{100}} \int_0^X \frac{dX}{f(X)} \quad (\text{b. 26})$$

Donde se recomienda utilizar el método del trapecio para la integral, debido a la complejidad que tiene la función $f(x)$.

$$I = \int_0^X \frac{dX}{f(X)} \left[\frac{s * m^3}{mol} \right] \quad (\text{b. 27})$$

La integración numérica por el método del trapecio se puede desarrollar de la siguiente ecuación:

$$I = \int_{x_1}^{x_2} y(x) dx = \frac{1}{2} \sum [(x_{i+1} - x_i)(y_{i+1} + y_i)] \quad (\text{b. 28})$$

Aplicando la integral a la ecuación de diseño del PFR:

$$I = \int_0^X \frac{1}{(-r_A)} dx = \frac{1}{2} \sum [(X_{i+1} - X_i) \left(\frac{1}{(-r_A)_{i+1}} + \frac{1}{(-r_A)_i} \right)] \quad (\text{b. 29})$$

Anexo C

Costo de Maquinaria y Equipos del Proceso

El costo de los equipos generalmente viene en catálogos de la empresa que se encuentra encargada del servicio, como no se tiene a disponibilidad se procederá al cálculo mediante ecuaciones aproximadas del costo.

Reactores

En la determinación del costo del reactor se utilizan las siguientes ecuaciones:

$$C(\$) = F_M * C_b + C_a \quad (\text{c. 1})$$

$$C_b = 1.218 * e^{[9.100 - 0.2889 * \ln(W) + 0.04576 * (\ln W)^2]} \quad (\text{c. 2})$$

$$C_a = 300 * D^{0.7396} * L^{0.7066} \quad (\text{c. 3})$$

Donde:

- W: peso del equipo [lb]
- FM: Factor de coste según el material de construcción.
- D: diámetro del equipo [ft].
- L: longitud del equipo [ft].

Tabla C.1: Factor de coste según el material de construcción.

Material de construcción	F _u
Stainless steel 316	2,7
Stainless steel 304	2,4
Stainless steel 347	3,0
Nickel	3,5
Monel	3,3
Inconel	3,8
Zirconium	11,0
Titanium	11,0
Brick-and-rubber-or brick-and-polyester-lined steel	2,75
Rubber-or lead-lined steel	1,9
Polyster, fiberglass-reinforced	0,32
Aluminium	2,7
Copper	2,3
Concrete	0,55

Fuente: (Towler & Sinnott, 1999)

Tabla C.2: Costos de los reactores de deshidrogenación oxidativa.

Variables	PRF-100	PRF-101
F _m	2,700	2,700
C _a	80.559,430	46.252,849
C _b	353.508,289	268.827,359
W	250.000,000	180.000,000
L	7,193	3,280
D	0,492	0,492
N	800	800
C [\$u\$]	10.350.318,1	7.720.867,190

Fuente: Elaboración propia en base a (Towler & Sinnott, 1999).

Columna de destilación

En la determinación del costo se utilizan las siguientes ecuaciones:

$$C(\$) = 1.218 * [f_1 * C_b + N * f_2 * f_3 * f_4 * C_t + C_{p1}] \quad (\text{c. 4})$$

$$C_b = 1.218 * e^{[7.123+0.1478*\ln(W)+0.02488*(\ln W)^2]} \quad (\text{c. 5})$$

$$C_t = 457.7 * e^{(0.1739*D_{\text{plato}})} \quad (\text{c. 6})$$

$$C_{p1} = 249.6 * D^{0.6332} * L^{0.6016} \quad (\text{c. 7})$$

$$f_4 = \frac{2.25}{1.0414^N} \quad (\text{c. 8})$$

Donde:

- N: número de platos.
- W: peso del equipo [lb].
- D: diámetro de la columna [ft].
- L: longitud de la columna [ft].
- f₁ y f₂: factor de costo en función del material.
- f₃: factor en función del plato.

Tabla C.3: Factor en función del tipo de plato.

Tipo de plato	f ₃
Valve	1,00
Grid	0,80
Bubble cap	1,59
Steve (with downcorner)	0,95

Fuente: (Towler & Sinnott, 1999)

Tabla C.4: Factores f_1 y f_2 .

Material	f_1	f_2
Stainless steel, 304	1,7	1,189+0,0577*D
Stainless steel, 316	2,1	1,401+0,0724*D
Carpenter 20CB-3	3,2	1,525+0,0788*D
Nickel-200	5,4	
Monel-400	3,6	2,306+0,1120*D
Inconel-600	3,9	
Inconel-825	3,7	
Titanium	7,7	

Fuente: (Towler & Sinnott, 1999)

Columna de absorción

En la determinación del costo se utilizan las ecuaciones de la columna de destilación a diferencia de las dos constantes siguientes:

$$C_b = 1.218 * e^{[6.629+0.1826*\ln(W)+0.02297*(\ln W)^2]} \quad (\text{c. 9})$$

$$C_{p1} = 300 * D^{0.7396} * L^{0.7068} \quad (\text{c. 10})$$

Tabla C.5: Costo de las columnas de destilación y absorción.

Variable	Regenerator to DEA	Regenerator to Furfural	Distillation Extractive	Absorción
D	5,50	6,50	4,92	5,00
L	45,00	50,00	80,00	30,00
W	56.578,00	74.740,00	83.885,00	36.591,00
f_1	2,10	2,10	2,10	2,10
f_2	1,87	1,87	1,87	1,80
C_b	10.255,79	10.851,92	11.110,40	8.090,93
C_t	1.191,14	1.417,38	1.076,86	1.091,94
N	8,00	20,00	50,00	15,00
C_{p1}	7.254,62	8.591,75	9.556,43	9.083,06
f_3	0,95	0,95	0,95	0,95
f_4	1,38	1,38	1,38	0,69
D	5,50	6,50	4,92	5,00
C [\$\$\$]	635.224,0	1.228.679,5	2.008.333,3	552.969,2

Fuente: Elaboración propia en base a (Towler & Sinnott, 1999).

Intercambiador de calor

En la determinación del costo del intercambiador de calor se utilizará las siguientes ecuaciones:

$$C(\$) = 1.218 * f_d * f_m * f_p * C_b \quad (\text{c. 11})$$

$$C_b = e^{[8.821 - 0.30863 * \ln(A) + 0.0681 * (\ln A)^2]} \quad (\text{c. 12})$$

$$f_m = g_1 + g_2 * (\ln A) \quad (\text{c. 13})$$

Donde:

- C: costo del intercambiador de calor [\$\$\$]
- A: área de intercambio [ft²]
- f_d, f_p, g₁ y g₂: son constantes.

Tabla C.6: Factor f_d en función del tipo de intercambiador de calor.

Tipo de intercambiador de calor	f _d
Fixed-head	$\exp[-1,1156 + 0,0806(\ln A)]$
Kettle reboiler	1,35
U-tube	$\exp[-0,9816 + 0,0830(\ln A)]$

Fuente: (Towler & Sinnott, 1999)

Tabla C.7: Factor f_p en función de la presión de operación.

Rango de presión [psig]	f _p
100-300	$0,7771 + 0,04981(\ln A)$
300-600	$1,0305 + 0,07140(\ln A)$
600-900	$1,1400 + 0,12088(\ln A)$

Fuente: (Towler & Sinnott, 1999)

Tabla C.8: Constantes g₁ y g₂ según el tipo de material.

Material	g ₁	g ₂
Stainless steel 316	0,8603	0,23296
Stainless steel, 304	0,8193	0,15984
Stainless steel 347	0,6116	0,22186
Nickel-200		0,00859
Monel-400		0,43377
Inconel-600		0,50784
Inconel-825		0,49706
Titanium		0,42913
Hastelloy	0,1549	0,51774

Fuente: (Towler & Sinnott, 1999)

Tabla C.9: Costos de los intercambiadores de calor.

Variable	E-100	E-101	L/R HEX
A	198,21	198,21	198,21
C _b	8.899,86	8.899,86	8.899,86
F _d	0,53	0,53	0,53
F _p	1,04	1,04	1,41
g ₁	0,86	0,86	0,86
g ₂	0,23	0,23	0,23
F _m	2,09	2,09	2,09
C [\$u\$]	124.906,60	124.906,60	169.032,00

Fuente: Elaboración propia en base a (Towler & Sinnott, 1999).

Bombas

En la determinación del costo de las bombas que se utilizara en el proceso se utilizó el método de correlaciones de Sinnott-Touler con la siguiente ecuación:

$$C = a + b * S^a \text{ [\$u\$]} \quad (\text{c. 14})$$

Donde:

- S: parámetro característico, en este caso caudal [l/s].
- a, b y n: constantes tabuladas.

Tabla C.10: Costo de las bombas.

Variable	P-100	P-101
Q	2,42	38,41
A	6.900,00	6.900,00
B	206,00	206,00
N	0,90	0,90
C [\$u\$]	73.569,00	123.931,6

Fuente: Elaboracion propia en base a (Towler & Sinnott, 1999).

Compresores

En la determinación del consto de los compresores se utiliza la correlación de Sinnott-Touler con la siguiente ecuación:

$$C = a + b * s^n \text{ [\$u\$]} \quad (\text{c. 15})$$

Donde:

- S: parámetro característico, en este caso potencia [kW].

- a, b y n: constantes tabuladas.

Tabla C.11: Costo de los compresores.

Variable	K-100	K-101
S	5.947,22	4.397,22
A	490.000,00	6.900,00
B	16.800,00	206,00
N	0,60	0,90
C [\$\$\$]	3.579.568,20	3.983.964,20

Fuente: Elaboración propia en base a (Towler & Sinnott, 1999).

La inversión total en el proyecto

Tabla C.12: Formato para determinar el costo de la inversión según J. Happel.

Concepto	Material	Mano de obra
Recipiente	A	10% de A
Torres, fabricadas en el terreno	B	30 a 35% de B
Torres prefabricados	C	10 a 15% de C
Intercambiadores	D	10% de D
Bombas, compresores y otra maquina	E	10% de E
Instrumentos	F	10 a 15% de F
(Suma de A a F)	G	
Aislamiento	H=5 a 10% de G	150% de H
Tuberías	I=40 a 50% de G	100% de I
Cimentaciones	J=3 a 5% de G	150% de J
Edificaciones	K=4% de G	70% de K
Estructuras	L=4% de G	20% de L
Material contra incendios	M=1/2 a 1% de G	500 a 800% de M
Electricidad	N=3 a 6% de G	150% de N
Pintura y limpieza	O=1/2 a 1% de G	500 a 800% de O
Suma de material y mano de obra	P	
Costes de equipos especiales instalados	Q	
Suma de P y Q	R	
Gastos Generales		30% de R
Total coste de construcción		130% de R
Honorarios de ingeniería (10% del coste total de construcción)		13% de R
Pagos por contingencia (10% del coste total de construcción)		13% de R
Inversión total		156% de R

Fuente: (Happel & Jordan , 1981)

El costo total de la compra de equipos está representado en la tabla C.12, realizando la sumatoria de todos los costos de los equipos.

La determinación de la inversión total, se calculó el costo de los equipos necesarios para la producción de 1,3-butadieno y también se utilizó el costo base de algunos equipos. Con estos datos se obtuvo el coste total de los equipos. Se realizará mediante el método de J. Happel, su procedimiento de estimación podemos apreciarlo en la tabla que se muestra en la tabla anterior.

Costo de instalación

Este costo está relacionado a la mano de obra, está asociada en la instalación de los equipos y maquinarias en la planta. Según el equipo que presenta J. Happel se encuentra aproximadamente con los datos que se encuentran en la tabla:

En la instalación de esta planta para la producción de 1,3-butadieno tenemos una gran cantidad de equipos sumamente cuidadosos, se tomaron valores críticos por la importancia de la seguridad de los mismos.

Aislamiento Térmico

Es el costo está en relación con la compra de material y su instalación, para la implementación de la planta y por la importancia que requiere se tomara un valor del 10%.

Costo de tuberías y válvulas

En la planta para la producción de 1,3-butadieno como tenemos varias etapas hasta obtener el producto final y según el método de J. Happel nos indica que cuando se está procesando fluidos se debe tomar un valor del 50% del costo de los equipos y maquinaria.

Instalación eléctrica

Según el método de J. Happel estos costos están el rango de 3 a 6%, debido a la plata que se implementara y al requerimiento de energía tomaremos un valor del 6% del costo de equipos y maquinaria.

Material contra incendios

En el método de Happel por la importancia que se requiere ante cualquier situación que atraviese la planta se tomara el valor del costo de los equipos y maquinaria.

En resumen, en la tabla C.13 según estos análisis anteriores se obtuvo los porcentajes fijos para determinar el costo de la inversión.

Tabla C.13: Porcentajes para determinar la inversión.

Concepto	Costo Material [Su\$]	Costo de mano de obra [Su\$]
Reactor tubular de lecho fijo (PRF-100)	A	35% A
Reactor tubular de lecho fijo (PRF-101)	A1	35 % A1
Columna de Destilación (R-DEA)	B	35 % B
Columna de Destilación (R-FURFURAL)	B1	35 % B1
Columna de Destilación (DE)	B2	35 % B2
Columna de Absorción (DEA)	B3	35 % B3
Intercambiador de calor (E-100)	C	10 % C
Intercambiador de calor (E-101)	C1	10 % C1
Intercambiador de calor (L/R HEX)	C2	10 % C2
Bomba (P-100)	D	10 % D
Bomba (P-101)	D1	10 % D1
Compresor (K-100)	E	10 % E
Compresor (K-101)	E1	10 % E1
Separador Flash (FWKO TK)	F	35 % F
Separador Flash (FLASH TK)	F1	35 % F1
Air Cooler (AC) 4	F2	35 % F2
(Suma de A a F)	G	
Aislamiento	H=10% de G	150% de H
Tuberías	I=50% de G	100% de I
Cimentaciones	J=5% de G	150% de J
Edificaciones	K=4% de G	70% de K
Estructuras	L=4% de G	20% de L
Material contra incendios	M=1% de G	800% de M
Electricidad	N=6% de G	150% de N
Pintura y limpieza	O=1% de G	800% de O
Suma de material y mano de obra	P	
Costes de equipos especiales instalados	Q	
Suma de P y Q	R	
Gastos Generales		30% de R
Total coste de construcción		130% de R
Honorarios de ingeniería (10% del coste total de construcción)		13% de R
Pagos por contingencia (10% del coste total de construcción)		13% de R
Inversión total		156% de R

Fuente: Elaboración propia en base a (Happel & Jordan , 1981).

Según a la tabla anterior realizaremos el cálculo para la inversión total del proyecto.

Costo de producción

Mano de obra directa

La determinación de la mano de obra directa es muy importante, debido a que varios costos indirectos están en función de este:

- Beneficios sociales
- Almacenes y suministros
- Laboratorio y control
- Seguridad
- Conservación
- Mejoras del proceso

Tabla C.14: Mano de obra directa en el proceso de producción de 1,3-butadieno.

Cargo	Cantidad de Trabajadores	Sueldo [\$/mes]	Costo total [/\$]
Directivos	2	6.168	12.336
Técnicos Especialistas	5	2.776	13.880
Jefes de sección	10	2.005	20.050
Operarios	30	1.851	55.530
Administración	12	1.600	19.200
Marketing	6	1.600	9.600
Recursos humanos	3	1.600	4.800
Calidad	3	1.600	4.800
Publicidad	4	1.600	6.400
Contabilidad	4	1.600	6.400
Informática	4	1.600	6.400
Técnicos de laboratorio	15	1.700	25.500
Técnicos de mantenimiento	10	1.750	17.500
Personal de limpieza	10	1.250	12.500
Personal de seguridad	8	1.250	10.000
Personal de recepción	2	1.250	2.500
Practicantes	2	610	1.220
Total mensual			228.616
Total anual			2.743.392

Fuente: Elaboración propia en base a (Happel & Jordan , 1981).

Servicios auxiliares

Los servicios auxiliares incluyen los gastos que se tienen en el proyecto por consumo de energía, agua y otros servicios que son importantes para la utilidad en el proceso de producción.

Tabla C.15: Servicios auxiliares en el proceso de producción de 1,3-butadieno.

Servicios Auxiliares	Precio [\$\$/unidad de medida]	Cantidad [unidad de medida/ año]	Costo [\$\$]
Agua [m3]	4,37	10.000	43.700,0
Electricidad [KW]	0,14	6.303.460	882.484,4
Total			926.184,4

Fuente: Elaboración propia en base a (Happel & Jordan , 1981).

Materia prima

Los costes de materia prima son muy importantes, en el proceso de producción de 1,3-butadieno se necesita como materia prima el n-butano y el oxígeno, en la tabla que se muestra a continuación se determinó el costo anual de la materia prima.

Tabla C.16: Costo de la materia prima en el proceso de producción de 1,3-butadieno.

Materia prima	Precio [\$\$/ton]	Cantidad [ton/año]	Costo [\$\$]
n-butano	600	120.686,52	72.411.912
Oxigeno	35	53.260,80	1.864.128
Total			74.276.040

Fuente: Elaboración propia en base a (Happel & Jordan , 1981).

Costos indirectos

Los costos indirectos están en función al costo de la mano de obra directa, la tabla C.17, fue elaborada según J. Happel, donde se indica el porcentaje de la mano de obra de cada costo indirecto.

Tabla C.17: Costos indirectos en el proceso de producción de 1,3-butadieno.

Costos Indirectos	Porcentaje de la mano de obra
Beneficios sociales	35%
Almacenes suministros	20%
Control y laboratorio	25%
Seguridad	20%
Conservación	10%
Mejoras del proceso	15%

Fuente: (Towler & Sinnott, 1999)

En la tabla se procedió al cálculo de los costos indirectos con los datos que se tenían en las tablas anteriores.

Tabla C.18: Costos indirectos en el proceso de producción de 1,3-butadieno.

Costos Indirectos	Costo [\$\$]
Beneficios sociales	960.187
Almacenes suministros	548.678
Control y laboratorio	685.848
Seguridad	548.678
Conservación	274.339
Mejoras del proceso	411.509
Total	3.429.240

Fuente: Elaboración propia en base a (Towler & Sinnott, 1999).

Gastos generales y amortización

Tabla C.19: Gastos generales y amortización en el proceso de producción de 1,3-butadieno.

Concepto	Cantidad	Costo [\$\$]
Amortizaciones y otros gastos	181.000.000	18.100.000

Fuente: Elaboración propia en base a (Happel & Jordan , 1981).

Debido a que se tiene todos los costos necesarios para la determinación del costo de producción, en la tabla C.20 se indica cuanto es el costo de producción de 1,3-butadieno.

Tabla C.20: Costo total de producción en el proceso de producción de 1,3-butadieno.

Concepto	Costo [\$\$]
Costo de materia prima	74.276.040,0
Costo de mano de obra	2.743.392,0
Costo de servicios auxiliares	926.184,4
Costos indirectos	3.429.240,0
Gastos generales	1.810.000,0
Total	83.184.856,4

Fuente: Elaboración propia en base a (Happel & Jordan , 1981).

Costo de transporte

La distancia desde la planta hasta el punto de exportación marítimo que es la ciudad de Arica en el país vecino de Chile, la distancia aproximada hasta esta ciudad es de 1350 [km] y el

consumo de combustible por la cisterna para el transporte es de 107.2 [L diésel] según la fuente (Distancias Himera) que nos indica estos valores aproximados.

La cantidad de 1,3-butadieno que se produce diariamente es: 252.24 [ton/día], las cisternas para el transporte de este producto tienen una capacidad de 48 [m³] con una capacidad de transporte del 85%.

$$\# \text{cisternas por dia} = 252,24 \left[\frac{\text{ton}}{\text{dia}} \right] * \frac{1.000 \left[\frac{\text{kg}}{\text{ton}} \right]}{1} * \frac{1}{615} \left[\frac{\text{m}^3}{\text{kg}} \right] * \frac{1}{0,85 * 48} \left[\frac{\text{Cisterna}}{\text{m}^3} \right]$$

$$\# \text{cisternas por dia} = 11$$

El costo de transporte será la suma de los siguientes costos

$$\text{Costo combustible} = 11 \left[\frac{\text{cisterna}}{\text{d}} \right] * 107,2 \left[\frac{\text{L diesel}}{\text{d}} \right] * 0,54 \left[\frac{\text{\$u\$}}{\text{L diesel}} \right] * 356 \left[\frac{\text{dias}}{\text{año}} \right]$$

$$\text{Costo combustible} = 232.420,32 \left[\frac{\text{\$u\$}}{\text{año}} \right]$$

$$\text{Costo del personal} = 33 \text{ trabajadores} * 1.000 \left[\frac{\text{\$u\$}}{\text{mes} * \text{trabajador}} \right] * 12 \left[\frac{\text{mes}}{\text{año}} \right]$$

$$\text{Costo del personal} = 396.000 \left[\frac{\text{\$u\$}}{\text{año}} \right]$$

$$\text{Costos adicionales} = 100.000 \left[\frac{\text{\$u\$}}{\text{año}} \right]$$

El costo total de transporte anual se determinará con la ecuación (c.16):

$$\text{Costo de transporte} = \text{Costo combustible} + \text{Costo del personal} + \text{Costos adicionales} \quad (\text{c. 16})$$

Reemplazando datos en la ecuación anterior:

$$\text{Costo de transporte} = 232.420,32 \left[\frac{\text{\$u\$}}{\text{año}} \right] + 396.000 \left[\frac{\text{\$u\$}}{\text{año}} \right] + \text{Costos adicionales} = 100.000 \left[\frac{\text{\$u\$}}{\text{año}} \right]$$

$$\text{Costo de transporte} = 728.420,32 \left[\frac{\text{\$u\$}}{\text{año}} \right]$$

Correo Electrónico: Sebatyan10gastv@gmail.com

Celular: 77538875



DIRECCIÓN DE DERECHO DE AUTOR
Y DERECHOS CONEXOS.
RESOLUCIÓN ADMINISTRATIVA NRO. 1-1257/2021
La Paz, 21 de Abril del 2021

VISTOS:

La solicitud de Inscripción de Derecho de Autor presentada en fecha **15 de Abril del 2021**, por **GUSTAVO SERGIO CHOQUE CONDORI**, con C.I. N° **8352977 LP**, con número de trámite **DA 511/2021**, señala la pretensión de inscripción del Proyecto de Grado titulado: "**OBTENCION DEL 1,3-BUTADIENO A PARTIR DEL N-BUTANO**", cuyos datos y antecedentes se encuentran adjuntos y expresados en el Formulario de Declaración Jurada.

CONSIDERANDO:

Que, en observación al Artículo 4º del Decreto Supremo N° 27938 modificado parcialmente por el Decreto Supremo N° 28152 el "*Servicio Nacional de Propiedad Intelectual SENAPI, administra en forma desconcentrada e integral el régimen de la Propiedad Intelectual en todos sus componentes, mediante una estricta observancia de los regímenes legales de la Propiedad Intelectual, de la vigilancia de su cumplimiento y de una efectiva protección de los derechos de exclusiva referidos a la propiedad industrial, al derecho de autor y derechos conexos; constituyéndose en la oficina nacional competente respecto de los tratados internacionales y acuerdos regionales suscritos y adheridos por el país, así como de las normas y regímenes comunes que en materia de Propiedad Intelectual se han adoptado en el marco del proceso andino de integración*".

Que, el Artículo 16º del Decreto Supremo N° 27938 establece "*Como núcleo técnico y operativo del SENAPI funcionan las Direcciones Técnicas que son las encargadas de la evaluación y procesamiento de las solicitudes de derechos de propiedad intelectual, de conformidad a los distintos regímenes legales aplicables a cada área de gestión*". En ese marco, la Dirección de Derecho de Autor y Derechos Conexos otorga registros con carácter declarativo sobre las obras del ingenio cualquiera que sea el género o forma de expresión, sin importar el mérito literario o artístico a través de la inscripción y la difusión, en cumplimiento a la Decisión 351 Régimen Común sobre Derecho de Autor y Derechos Conexos de la Comunidad Andina, Ley de Derecho de Autor N° 1322, Decreto Reglamentario N° 23907 y demás normativa vigente sobre la materia.

Que, la solicitud presentada cumple con: el Artículo 6º de la Ley N° 1322 de Derecho de Autor, el Artículo 26º inciso a) del Decreto Supremo N° 23907 Reglamento de la Ley de Derecho de Autor, y con el Artículo 4º de la Decisión 351 Régimen Común sobre Derecho de Autor y Derechos Conexos de la Comunidad Andina.

Que, de conformidad al Artículo 18º de la Ley N° 1322 de Derecho de Autor en concordancia con el Artículo 18º de la Decisión 351 Régimen Común sobre Derecho de Autor y Derechos Conexos de la Comunidad Andina, referentes a la duración de los Derechos Patrimoniales, los mismos establecen que: "*la duración de la protección concedida por la presente ley será para toda la vida del autor y por 50 años después de su muerte, a favor de sus herederos, legatarios y cesionarios*".

Que, se deja establecido en conformidad al Artículo 4º de la Ley N° 1322 de Derecho de Autor, y Artículo 7º de la Decisión 351 Régimen Común sobre Derecho de Autor y Derechos Conexos de la Comunidad Andina que: "*...No son objeto de protección las ideas contenidas en las obras literarias, artísticas, o el contenido ideológico o técnico de las obras científicas ni su aprovechamiento industrial o comercial*".

Que, el artículo 4, inciso e) de la ley 2341 de Procedimiento Administrativo, instituye que: "*... en la relación de los particulares con la Administración Pública, se presume el principio de buena fe. La confianza, la cooperación y la*



Oficina central - La Paz
Av. Argentina, n.º 1914,
Edif. Angélica María,
entre Villalobos y Díaz Romero,
zona Miraflores
Telfs.: 2195700 - 219276 - 219251
Fax: 2195700

Oficina distrital - El Alto
Av. Juan Pablo II, n.º 2560,
Edif. Multicentro El Ceibo Ltda.,
piso 2, ofic. 18,
zona 16 de Julio
Telf.: 2141001

Oficina distrital - Cochabamba
Calle Chuquisaca, n.º 649,
piso 2, entre Antezana y Lanza,
zona Central - Noroeste
Telf.: 4141403

Oficina distrital - Santa Cruz
Prolongación Quijarro,
Esq. Uruguay, n.º 29
Edif. Bicentenario, 1er. Anillo
Telf.: 3121752

Oficina distrital - Chuquisaca
Calle Kilómetro 7, n.º 366
casi esq. Urriolagoitia
zona Parque Bolívar
Telf.: 72005873

Oficina distrital - Tarija
Calle Ingavi, n.º 156
entre Colón y Suipacha
Edif. Coronado, piso 2,
Ofic. 202, zona Central
Telf.: 72015286

Oficina distrital - Oruro
Calle 6 de Octubre, n.º 5837
entre Ayacucho y Junín,
Galería Central, ofic. 14 (ex. Banco Fie)
Telf.: 67201288

lealtad en la actuación de los servidores públicos y de los ciudadanos ...", por lo que se presume la buena fe de los administrados respecto a las solicitudes de registro y la declaración jurada respecto a la originalidad de la obra.

POR TANTO:

La Directora de Derecho de Autor y Derechos Conexos a.i., sin ingresar en mayores consideraciones de orden legal, en ejercicio de las atribuciones conferidas.

RESUELVE:

INSCRIBIR en el Registro de Tesis, Proyectos de Grado, Monografías y Otras Similares de la Dirección de Derecho de Autor y Derechos Conexos, el Proyecto de Grado titulado: "**OBTENCION DE 1,3-BUTADIENO A PARTIR DEL N-BUTANO**", a favor del autor y titular: **GUSTAVO SERGIO CHOQUE CONDORI**, con C.I. N° **8352977 LP**, bajo el seudónimo **GUSTAVITOS**, quedando amparado su derecho conforme a Ley, salvando el mejor derecho que terceras personas pudieren demostrar.

Regístrese, Comuníquese y Archívese.



Dra. Claudia Irahana De La Gálvez Murillo Capllanch
**DIRECTORA DE DERECHO DE AUTOR
Y DERECHOS CONEXOS a.i.**
SERVICIO NACIONAL DE PROPIEDAD INTELECTUAL.



CIDC/ams
c.c.Arch.

Oficina central - La Paz
Av. Argentina, n.º 1914,
Edif. Angélica María,
entre Villalobos y Díaz Romero,
zona Miraflores
Telfs.: 2157000 - 219276 - 219251
Fax: 215700

Oficina distrital - El Alto
Av. Juan Pablo II, n.º 2560,
Edif. Multicentro El Ceibo Ltda.,
piso 2, ofic. 1A,
zona 16 de Julio
Telf.: 2141001

Oficina distrital - Cochabamba
Calle Chuquisaca, n.º 649,
piso 2, entre Antezana y Lanza,
zona Central - Noroeste
Telf.: 4141403

Oficina distrital - Santa Cruz
Prolongación Quijarro,
Esq. Uruguay, n.º 29
Edif. Bicentenario, 1er. Anillo
Telf.: 3121752

Oficina distrital - Chuquisaca
Calle Kilómetro 7, n.º 366
casi esq. Urriologotía
zona Parque Bolívar
Telf.: 72005873

Oficina distrital - Tarija
Calle Ingavi, n.º 156
entre Colón y Suipacha
Edif. Coronado, piso 2,
Ofic. 202, zona Central
Telf.: 72015286

Oficina distrital - Oruro
Calle 6 de Octubre, n.º 5837
entre Ayacucho y Junín,
Galería Central, ofic. 14 (ex. Banco Fie)
Telf.: 67201288