

MODELAT I DISSENY D'UN REACTOR D'HIDROTRACTAMENT PER A LA PRODUCCIÓ DE BIOCOMBUSTIBLES

Treball Final de Grau

Identificador: TFGEQ_2507

Membres: Marian Alexandru Gavril

Miquel Prats Pavia

Daniel Silva Argilaga

Tutor: Jordi Ballesteros Soberanas

Grau: Enginyeria Química

Tarragona, 9 de juny de 2025

Departament d'Enginyeria Química. Universitat Rovira i Virgili.

Vist i plau pel lliurament i defensa del TFG del grau d'Enginyeria Química.

TÍTOL DEL TFGEQ: MODELAT I DISSENY D'UN REACTOR D'HIDROTRACTAMENT PER A LA PRODUCCIÓ DE BIOCOMBUSTIBLES

SUBTÍTOL

.....

AUTOR: **Marian Alexandru Gavril**

CURS ACADÈMIC: **2024-2025**

VIST I PLAU DEL TUTOR ACADÈMIC

En/Na **Jordi Ballesteros Soberanas,**

en la seva capacitat de tutor acadèmic fa constar que considera que el TFGEQ

és adequat i en conseqüència recomana la seva defensa

no en recomana la defensa per presentar les mancances exposades en el document annex

Signatura:

Data: 09/06/2025

BALLESTEROS SOBERANAS, JORDI (FIRMA)
Firmado digitalmente por BALLESTEROS SOBERANAS, JORDI (FIRMA)
Fecha: 2025.06.22 21:05:36 +02'00'

DECLARACIÓ D'ABSÈNCIA DE CONFLICTES DE CONFIDENCIALITAT

En/Na **Jordi Ballesteros Soberanas,**

en la seva capacitat de supervisor extern^(*) del treball fa constar que ha revisat el contingut del TFGEQ i que no conté cap informació que pugui ser considerada com confidencial per part de l'empresa **Repsol S.A.**

^(*) Cas que el TFGEQ no sigui extern serà el professor tutor qui emplenarà aquesta secció

Signatura:

Data: 09/06/2025

BALLESTEROS SOBERANAS, JORDI (FIRMA)
Firmado digitalmente por BALLESTEROS SOBERANAS, JORDI (FIRMA)
Fecha: 2025.06.22 21:05:51 +02'00'

ABSTRACT

*This project focuses on the modeling and designing of a **hydrotreatment reactor** to produce **biofuel** from bio-based feedstocks, in compliance with the European Union's RED II and RED III sustainability and energy efficiency directives. Given the pressing need to reduce the carbon footprint of fuels, production processes like this are crucial to achieve the proposed targets.*

*The modeled process involves the first of two consecutive reactors: the **hydrodeoxygenation reactor (HDO)**. In this exothermic reaction scheme, the main feedstock considered is used cooking oil mostly composed by **olive oil**, rich in triglycerides and fatty acids, which undergoes conversion into linear alkanes (heptadecane and octadecane) under high-pressure and high-temperature conditions.*

*The scope of this project includes **reactor** modeling using **MATLAB®** based on known reaction schemes and kinetic equations; reactor equipment design and sizing, the development of the process flow diagram (PFD) and piping and instrumentation diagram (P&ID) for the **reactor** section. Additionally, the control system is supported by a Hazard and Operability Study (HAZOP) to ensure operational safety.*

Keywords: hydrotreatment reactor, biofuel, hydrodeoxygenation, olive oil, MATLAB®

AGRAÏMENTS

Volem expressar el nostre agraïment a totes les persones que han fet possible aquest treball de final de grau i, en general, que han estat presents al llarg de tota l'etapa formativa.

En primer lloc, al nostre tutor, Jordi Ballesteros, qui té un coneixement excepcional en l'àmbit en el qual es troba aquest projecte. La seva ajuda i paciència han fet que realitzar una tasca com és la modelització d'un reactor amb MATLAB® sembli fàcil. La seva dedicació, suport i orientació al llarg de tot el projecte han estat claus per encaminar adequadament el treball. Gràcies també per tots els consells i les "xapes" que, sens dubte, en un futur ens seran útils en la nostra trajectòria professional.

Tanmateix, agraïm als professors que han estat disposats a resoldre els dubtes que han anat sorgint i que han aportat idees i consells per millorar aspectes del treball.

D'igual manera, cal mencionar als companys que donen un cop de mà quan el grup s'encalla en un problema i fan les tardes de treball més agradables: Albert, Iván, Laia, Jaume, Maria, Ari, Pedro, Nadir, Oriol i a tot el grup d'amics.

Finalment, gràcies de tot cor a familiars i amics pel suport constant durant aquesta etapa formativa. El seu acompanyament, tant en els moments difícils com en els de descans, ha estat clau per arribar fins aquí.

ÍNDIX

1.	INTRODUCCIÓ.....	1
2.	ABAST DEL PROJECTE.....	2
	2.1 Abast	2
	2.2 Marc regulador	2
3.	BASES DE DISSENY	3
	3.1 Capacitat de la planta	3
	3.2 Factor d'utilització	3
	3.3 Productes finals	3
	3.4 Matèries primes	3
	3.5 Condicions en límit de bateria.....	4
4.	DESCRIPCIÓ DE LA UNITAT DE PROCÉS.....	5
	4.1 Descripció bàsica de la química del procés.....	5
	4.2 Descripció del procés	7
	4.3 Diagrames de flux de procés (PFD).....	8
	4.4 Balanç de matèria.....	10
5.	CRITERIS DE DISSENY DEL REACTOR D'HIDROTRACTAMENT	11
	5.1 Criteris generals	11
	5.2 Condicions de disseny.....	11
	5.3 Simulació amb el software MATLAB®	12
	5.3.1 Mida, forma i disseny	14
6.	LLISTAT D'EQUIPS.....	16
7.	CONSUM DE SERVEIS AUXILIARS.....	17
	7.1 Consum de <i>heaters</i>	17
	7.2 Consum de <i>coolers</i>	17
	7.3 Conclusions de l'estimació de <i>utilities</i>	18
8.	FITXA D'ESPECIFICACIÓ DEL REACTOR	19
9.	LLISTAT DE CANONADES	21
10.	LLISTAT D'INSTRUMENTACIÓ	23
11.	SISTEMA D'ENCLAVAMENTS	25
12.	DIAGRAMA DE CANONADES I INSTRUMENTACIÓ DEL REACTOR D'HIDROTRACTAMENT	26
	BIBLIOGRAFIA	28
A.	MODELITZACIÓ DEL REACTOR D'HIDROTRACTAMENT	31
	A.1 Validació del model conegut	32
	A.2 Disseny del reactor amb flux continu	34
	A.3 Implementació del balanç d'energia al reactor.....	37
	A.4 Estratègies de control de temperatura a l'interior del reactor.....	40
	A.5 Anàlisi de sensibilitat del reactor d'hidrotractament.....	43

A.5.1 Cabal d'injecció de <i>quench</i>	43
A.5.2 Temperatura d'injecció de <i>quench</i>	50
A.5.3 Temperatura d'alimentació al reactor PBR	57
A.5.4 Cabal d'hidrogen a l'alimentació del reactor PBR	64
A.6 Resum de les condicions d'operació i perfils de la simulació de MATLAB®	72
A.7 Codis de la simulació del reactor del software MATLAB®	74
A.7.1 Validació del model – reactor <i>batch</i>	74
A.7.2 Reactor PBR isotèrmic.....	76
A.7.3 Reactor PBR no-isotèrmic	80
A.7.4 Reactor PBR no-isotèrmic amb estratègies de control de temperatura	84
B. CÀLCUL DE LA GEOMETRIA DEL REACTOR	89
B.1 Pèrdua de càrrega.....	89
B.2 <i>Internals</i> del reactor	91
B.3 Càlculs dels espessors del reactor	92
C. ESTIMACIÓ DE COSTOS DEL REACTOR	93
D. DISSENY DE CANONADES	94
E. ANÀLISI HAZOP.....	95
F. FITXES DE SEGURETAT DELS COMPOSTOS.....	98
F.1. Oli d'oliva	98
F.2. Hidrogen.....	109
F.3. Octadecà.....	118

1. INTRODUCCIÓ



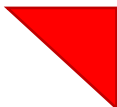
Aquest projecte ha estat realitzat amb l'empresa Repsol S.A. a Tarragona, amb la finalitat de desenvolupar un projecte d'interès amb aquesta i adquirir coneixements en projectes reals del sector industrial.

Taula 1.1. Identificació del projecte.

Títol	Modelat i disseny d'un reactor d'hidrotractament per a la producció de biocombustibles
Identificador	TFGEQ_2507
Tutor	Ballesteros Soberanas, Jordi
Data i localització	Tarragona, 9 de juny de 2025
Autors	Marian Alexandru Gavril Miquel Prats Pavia Daniel Silva Argilaga

S'identificarà el treball realitzat per cada autor mitjançant un codi de colors esmentat a la Taula 1.2. El color corresponent es mostrarà a la cantonada superior dreta (i esquerra en cas d'haver-hi més d'un autor). A més a més, en el cas dels diagrames, la informació pertinent es troba al caixetí del mateix.

Taula 1.2. Distribució del codi de colors pels diferents autors del projecte.

Tots els autors	Cap color
Marian Alexandru Gavril	
Miquel Prats Pavia	
Daniel Silva Argilaga	

2. ABAST DEL PROJECTE

2.1 Abast

Aquest projecte té com a objectiu principal el modelat d'un reactor químic d'hidrotractament per a la producció de biocombustibles de baixa petjada de carboni mitjançant el processat d'alimentacions d'origen biològic, responent a les directrius de sostenibilitat i eficiència energètica anomenats RED II i RED III^[8] imposats per la UE.

El model emprat conté un esquema de reaccions i d'equacions cinètiques coneguts. El procés d'hidrotractament real consta de dos reactors consecutius (un d'hidrodesoxigenació i un altre d'isomerització), però només el primer d'aquests dos entra dins de l'abast d'aquest projecte. Per tant, el disseny conceptual comprèn la secció de la planta d'hidrotractament en la qual s'obtenen els productes desitjats previs al reactor d'isomerització. Durant la realització del projecte, es porten a terme les següents tasques:

- Estudi de l'alimentació per a la producció de biodièsel 2G
- Modelat del reactor fent ús del software MATLAB®
- Disseny i dimensionament de l'equip, considerant criteris tècnics i normatius
- Elaboració de plànols i fulls d'especificació del reactor
- Desenvolupament del diagrama de flux de procés (PFD) i el diagrama de canonades i instrumentació (P&ID) de la secció del procés on s'integra el reactor
- Disseny del sistema de control, incloent-hi la seva integració mitjançant una anàlisi HAZOP del reactor

Fora de l'abast del projecte queden tasques com la validació experimental del model, el disseny exhaustiu dels equips auxiliars del procés, l'avaluació econòmica de la planta, o qualsevol altra que no estigui centrada en el modelat, el disseny del reactor, o el seu entorn directe.

2.2 Marc regulador

El projecte troba la motivació dins del marc regulador establert per la Unió Europea en matèria d'energies renovables a les directives RED II i RED III^[8].

La directiva RED II (2018/2001) és l'actualització de la Directiva d'Energies Renovables i va establir un objectiu vinculant del 32% d'energies renovables en el consum total de la UE per al 2030. Addicionalment, va establir una sèrie de requisits estrictes sobre la sostenibilitat i la producció de biocombustibles i biogàs, i altres combustibles sostenibles.

La directiva RED III reforça els objectius de l'anterior, augmentant la taxa d'energies renovables fins al 42.5% amb l'objectiu d'arribar al 45% al 2030. També incrementa els criteris i les restriccions sobre la producció de combustibles sostenibles. Aquesta directiva també estableix una sèrie de criteris de sostenibilitat i restriccions sobre les matèries primes a utilitzar en la producció de combustibles. Dites matèries es troben descrites en detall en els annexos 9A i 9B, on es defineixen, entre d'altres matèries primeres, quins són els olis que poden ser utilitzats segons la seva procedència.

3. **BASES DE DISSENY**

3.1 **Capacitat de la planta**

La capacitat productiva de la planta és de 200,000 tones per any dels alcans produïts per l'hidrotractament.

3.2 **Factor d'utilització**

El factor d'utilització de la planta és del 91.3% de les hores anuals, és a dir, 8,000 hores aproximadament.

3.3 **Productes finals**

Els productes resultants de l'hidroprocessat són l'heptadecà ($C_{17}H_{36}$) i l'octadecà ($C_{18}H_{38}$).

3.4 **Matèries primes**

A l'hora d'escollir les matèries primeres que s'alimenten al reactor, per tal de produir biocombustibles, la Unió Europea estableix una sèrie de requisits obligatoris per tal de garantir la sostenibilitat tant ambiental, com en l'àmbit de competència amb altres indústries com l'alimentària.

Per aquest motiu, i seguint les recomanacions de l'annex 9A i 9B de la directiva RED^[8], les principals propostes a utilitzar són els olis de cuina usats (UCO) o els greixos animals. Per a aquests primers, s'estima que a Espanya es genera prop de 350 milions de litres d'olis, procedents de domicilis, activitats comercials i administracions públiques^[6]. Pel que fa als greixos animals, aquests no poden competir amb la indústria alimentària, per tant, han de ser residus d'escorxadors o altres subproductes animals descrits en el SANDACH (Subproductos de Origen Animal no Destinados al Consumo Humano)^[17] basat en el Reglament (CE) Núm. 1069/2009 de UE.

D'aquestes matèries primeres s'han d'extreure els seus àcids grassos. Depenent de l'oli o greix, sent l'oli d'oliva el més usat, el principal àcid gras que s'obté és l'oleic, igual que amb els greixos animals de porc i aus, l'oleic representa aproximadament el 50% dels àcids grassos. Per tal de centrar l'estudi en una matèria primera, s'ha seleccionat l'opció d'olis de cuina usats, en específic un oli usat que estigui compost principalment d'oli d'oliva, per ser dels més consumits a escala nacional. Aquest oli està format principalment per triglicèrids i conté petites quantitats d'àcids grassos lliure (FFA) a més d'altres compostos. La principal composició dels àcids grassos de l'oli d'oliva es troben a la següent taula:

Taula 3.1. Àcids grassos del oli d'oliva^[9]

Àcid gras	Llargada de la cadena	Dobles enllaços (Insaturacions)	Valor (%)
Mirístic	14	0	0.010
Palmític	16	0	12.09
Palmitoleic	16	1	1.15
Margàric	17	0	0.05
Margaroleic	18	1	0.10
Estearic	18	0	3.01
Oleic	18	1	72.77
Linoleic	18	2	9.47
Linolènic	18	3	0.60
Araquídic	20	0	0.36
Eicosànic	20	1	0.23
Behènic	22	0	0.11
Lignocèric	24	0	0.05

Partint de les dades de la taula, es pot estimar una longitud mitjana de les cadenes dels àcids grassos presents de 18 carbonis amb un doble enllaç.

3.5 Condicions en límit de bateria

Al límit de bateria es troba l'entrada d'hidrogen gas al procés, amb la seva conseqüent purga, el tanc d'emmagatzematge d'oli d'oliva refinat i la sortida de productes cap al reactor d'isomerització R-102, ubicat en la següent secció de la planta d'hidrotractament. Tanmateix, s'especifiquen les *utilities* emprades en l'operació de la planta. Aquestes són: vapor d'alta (HP *Steam*) i baixa pressió (LP *Steam*), aigua de refrigeració (*cooling water*) i aigua de caldera.

Taula 3.2. Condicions dels corrents en límit de bateria de la planta d'hidrotractament.

Variable // Corrent	Oli d'oliva refinat	Productes finals	Entrada d'hidrogen	Purga d'hidrogen	HP // LP <i>Steam</i>	<i>Cooling water</i>	Aigua de caldera
Temperatura (°C)	50	A la que requereixi R-102	Desconegut, provinent de línia SMR	70	263.94	-	-
Pressió (bar)	1	20		5	50 // 4	-	-
Cabal (t/h)	43.1	25.3	1.12	0.25	2.40 // 0.50	28.2	4.87

*Consum elevat de *cooling water* a causa de la ineficiència del bescanvi E-106.

Tal i com s'explica a l'apartat 7, l'aigua de caldera és utilitzada per produir vapor saturat a 15 bar, gràcies al generador de vapor E-104.

4. DESCRIPCIÓ DE LA UNITAT DE PROCÉS

4.1 Descripció bàsica de la química del procés

Les parts de l'hidrotractament compreses en aquest reactor R-101 són la hidrodesoxigenació (HDO) i la descarboxilació. L'esquema de reacció consta de 2 camins: el primer (HDO) resulta en un n-alcà amb el mateix nombre de carbonis a la cadena que el seu corresponent àcid gras en el triglicèrid original, mentre que al segon (descarboxilació), l'oxigen és retirat com a CO (també CO₂, però aquest no és considerat al model emprat) dels productes intermedis formats a partir del corresponent triglicèrid. En aquest últim cas, el n-alcà resultant conté un carboni menys que la cadena de l'àcid gras corresponent del triglicèrid original. El procés es porta a terme en presència de catalitzadors metàl·lics, dels quals se'n parla posteriorment.

S'ha de tenir en compte que, a la modelització real del reactor, inicialment ocorre la hidrogenació de la olefina en molt poc temps mitjançant monoglicèrids i diglicèrids intermedis amb propà com a producte secundari. Seguidament, els àcids grassos es redueixen a aldehyds en presència d'hidrogen sobre el catalitzador metàl·lic emprat. L'aldehyd gras resultant es converteix en alcà segons 2 camins alternatius.

El primer camí de reacció consisteix en dues reaccions consecutives. Primerament, l'aldehyd gras es redueix a alcohol gras en presència d'hidrogen sobre el catalitzador metàl·lic i, seguidament, aquest es deshidrata per obtenir l'alcà corresponent. L'alcà conté el mateix nombre de carbonis que el de l'àcid gras produït a partir de la hidrogenació del seu triglicèrid corresponent, sent el producte energèticament més desitjat.

El segon camí de reacció consisteix en la descarboxilació de l'aldehyd gras, obtenint l'alcà corresponent i CO. L'alcà conté un carboni menys que el nombre de carbonis de l'àcid gras obtingut a partir de la hidrogenació del seu triglicèrid corresponent. A continuació, es mostra l'esquema de les reaccions del procés:

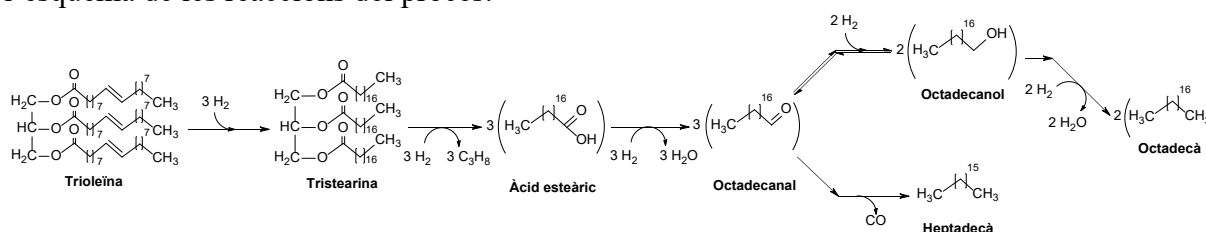


Figura 4.1. Esquema de reaccions del procés d'hidrotractament.

Aquests camins de reacció, junt amb els paràmetres cinètics associats a les reaccions, són els postulats per l'article^[16], i fan referència a un catalitzador en fase de desenvolupament de níquel suportat en alumina (Ni/Al₂O₃). Per tant, el reactor serà dimensionat en base a aquest catalitzador i el seu rendiment en condicions industrials. Tanmateix, es citen altres catalitzadors industrials que poden ser candidats realistes, segons les condicions necessàries. Aquests han estat cercats al catàleg del llicenciant *Haldor Topsoe*^[4]:

- TK-3000 PhosTrap
- TK-330, 335, 337, 339, 340, 341, 342, 359 i 361

Aquests catalitzadors industrials, com els de la sèrie TK-330 a TK-361, són formulacions comercials de metalls actius com el NiMo o CoMo sobre suports millorats, amb capacitat demostrada per a la hidrodessulfuració, hidrodessulfuració i estabilització de compostos pesants. A la Taula 4.1 s'esmenten les funcions, tipus de càrrega i característiques destacades dels catalitzadors citats.

Taula 4.1. Llistat de catalitzadors alternatius a l'especificat en el model de l'article.

Catalitzador	Funció principal	Tipus de càrrega	Característica destacada
TK-3000 PhosTrap	Eliminació de fòsfor (protecció del catalitzador actiu)	Pretractament de l'alimentació	Alta capacitat d'adsorció de fòsfor
TK-330	Hidrodessulfuració moderada + possible hidrodessulfuració	Corrents moderadament contaminats	CoMo/Al ₂ O ₃ optimitzat per hidrodessulfuració
TK-335	Hidrodessulfuració i hidrodessulfuració equilibrades	Compostos oxigenats	Alta estabilitat i activitat amb oxigen i compostos pesants
TK-337	Hidrodessulfuració	Olis vegetals amb traces de sofre i nitrogen	NiMo amb excel·lent dispersió metàl·lica
TK-339	Hidrodessulfuració + bona resistència a contaminants	Càrregues vegetals i residus	Elevada activitat sota condicions severes
TK-340	Hidrodessulfuració + hidrodessulfuració	Càrregues pesades i nitrogenades	Alta resistència a <i>fouling</i> i llarga vida útil
TK-341	Hidrodessulfuració i hidrodessulfuració amb elevada selectivitat	Olis amb alt contingut en oxigen	Balanç ideal entre rendiment i vida útil
TK-342	Hidrodessulfuració intensiva	Fracions pesades d'oxigen, nitrogen i aromàtics	Alta capacitat de conversió amb bona selectivitat
TK-359	Hidrogenació d'aromàtics + hidrodessulfuració	Corrents complexes amb aromàtics	Especialitzat en saturar dobles enllaços i millorar les propietats del producte
TK-361	Hidrodessulfuració eficient amb control de reaccions secundàries	Càrregues oxigenades i purificades	Alta selectivitat a parafines lineals (biocombustibles avançats)

4.2 Descripció del procés

La producció de biocombustibles a partir d'olis de cuina usats consta de dues parts principals: el reactor d'hidrotractament (HDO + descarboxilació) i el reactor d'hidroisomerització (HI). Aquest projecte està centrat només en el primer reactor R-101 i les seves respectives unitats de separació per obtenir els productes necessaris pel segon reactor R-102.

El procés inicia amb la preparació de la matèria primera, l'oli d'oliva refinat, filtrat i assecat per tal d'evitar introduir qualsevol impuresa, partícula sòlida o restes d'aigua al reactor. L'oli es dirigeix des dels tancs d'emmagatzematge API (T-101 a T-104) cap al forn F-101 (corrent 3), impulsat per la seqüència de bombes P-102 fins a 70 bar (no es coneix la etapa de bombeig en detall perquè no s'ha dimensionat). La bomba P-101 i el bescanviador E-101 són utilitzats per mantenir la temperatura de l'oli d'oliva dins del tanc, mitjançant la recirculació contínua d'aquests. L'objectiu del forn és el d'iniciar l'arrancada del procés (*start-up*) escalfant les matèries a 250-270°C aproximadament (corrents 4, 5 i 7). Una vegada el procés ha assolit l'estat estacionari, el preescalfament de l'oli es porta a terme amb un bescanviador de calor de tubs i carcassa (E-102), on es creua el corrent de sortida del reactor R-101 (corrent 9A) i el corrent d'oli d'oliva procedent del tanc T-101 (corrent 3B). Durant l'estat estacionari, es fa un bypass del forn F-101, passant pel corrent 6. La temperatura d'entrada al reactor R-101, un cop assolit l'estat estacionari, és de 140°C. Pel que fa a l'hidrogen, aquest es subministra a partir d'una línia provinent de les unitats de SMR (*Steam Methane Reforming*) (corrent 21A). Es mescla amb l'hidrogen recirculat (corrent 22A) i s'escalfa al bescanviador E-103 fins la temperatura d'entrada del reactor, 140°C.

A l'entrada del reactor R-101 (corrent 8), s'introdueix el corrent d'hidrogen i oli escalfats. El reactor opera a 70 bar i s'assoleix una temperatura màxima d'operació de 380°C. Dins d'aquest es produeix l'esquema de reaccions esmentat i, per tal de separar els productes no desitjats dels alcans, hi ha un seguit d'operacions unitàries per tractar el *downstream*. La sortida del reactor R-101 (corrent 9A) es dirigeix cap al HPS-101 (*High Pressure Separator*), passant primer pel bescanviador de tubs i carcassa E-102 i un generador de vapor E-104 on es refreda fins a uns 200°C, aprofitant el calor residual del corrent per produir vapor saturat a 15 bar. Un cop al separador HPS-101 (corrent 9C), aquest opera a 120°C i 40 bar, separant l'aigua líquida (corrent 10) per baix i expulsant els gasos incondensables (corrent 11) per dalt. L'aigua s'envia cap a tractament, mentre que els gasos incondensables (CO i H₂) són dirigits a l'*scrubber* SC-101 (el qual injecta un corrent de dietilamina polvoritzada) i a les PSA-101 i PSA-102 (*pressure-swing adsorption*) amb l'objectiu d'obtenir l'hidrogen pur i recircular-ne part d'aquest. Finalment, part de l'hidrogen es recircula (corrent 19A) per ser aprofitat un altre cop al procés de reacció i l'altra es purga (corrent 20).

Pel que fa al corrent líquid de sortida del separador (corrent 12A), que conté els productes del procés (C₁₈H₃₈ i C₁₇H₃₆), propà i traces de sofre i nitrogen, s'escalfa amb el bescanviador E-105 i s'envia a un *stripper* S-101 per extreure totes les traces existents de H₂S, NH₃ i propà. El corrent de sortida sense contaminants (corrent 14) es separa en dos corrents: un es refreda per utilitzar-lo com a *quench* de la reacció al reactor R-101 (corrents 16) i l'altre s'escalfa i es dirigeix cap a la segona part del procés, la hidroisomerització (corrent 15).

4.3 **Diagrames de flux de procés (PFD)**


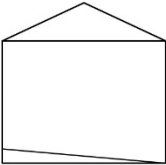
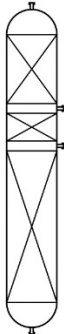
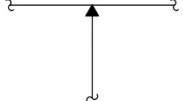
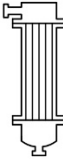
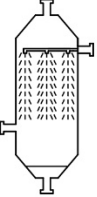
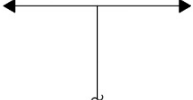




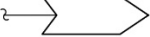
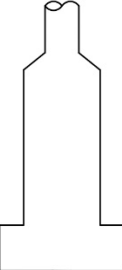
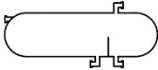
CANONADES		EQUIPS																				
	Identificació numèrica de la canonada (xx)		Tanc atmosfèric tipus API		Reactor d'hidrotractament																	
	Unió de canonades tipus T soldada		Bescanviador de tubs i carcassa			Scrubber																
	Divisió de canonades tipus T soldada		Bomba centrífuga		Stripper																	
	Entrada a procés		Compressor																			
	Sortida de procés		Forn																			
ANOTACIONS			Separador d'alta pressió																			
X-101	Etiqueta identificació equips X: Tipus d'equip 101: Número d'equip	<table border="1"> <tr> <td>DESIGNED</td> <td colspan="4" rowspan="2">PROCESS FLOW DIAGRAM</td> </tr> <tr> <td>DRAWN <i>Marian Alexandru Govril</i></td> </tr> <tr> <td>CHECKED</td> <td colspan="4" rowspan="2">KEY</td> </tr> <tr> <td>APPROVED</td> </tr> <tr> <td></td> <td>PROJECT NUMBER <i>IFGEQ_250'</i></td> <td>SCALE <i>Not to scale</i></td> <td>BLOCK <i>1</i></td> <td>REVISED</td> </tr> </table>				DESIGNED	PROCESS FLOW DIAGRAM				DRAWN <i>Marian Alexandru Govril</i>	CHECKED	KEY				APPROVED		PROJECT NUMBER <i>IFGEQ_250'</i>	SCALE <i>Not to scale</i>	BLOCK <i>1</i>	REVISED
DESIGNED	PROCESS FLOW DIAGRAM																					
DRAWN <i>Marian Alexandru Govril</i>																						
CHECKED	KEY																					
APPROVED																						
	PROJECT NUMBER <i>IFGEQ_250'</i>	SCALE <i>Not to scale</i>	BLOCK <i>1</i>	REVISED																		

Figura 4.2. Nomenclatura del *process flow diagram* (PFD).

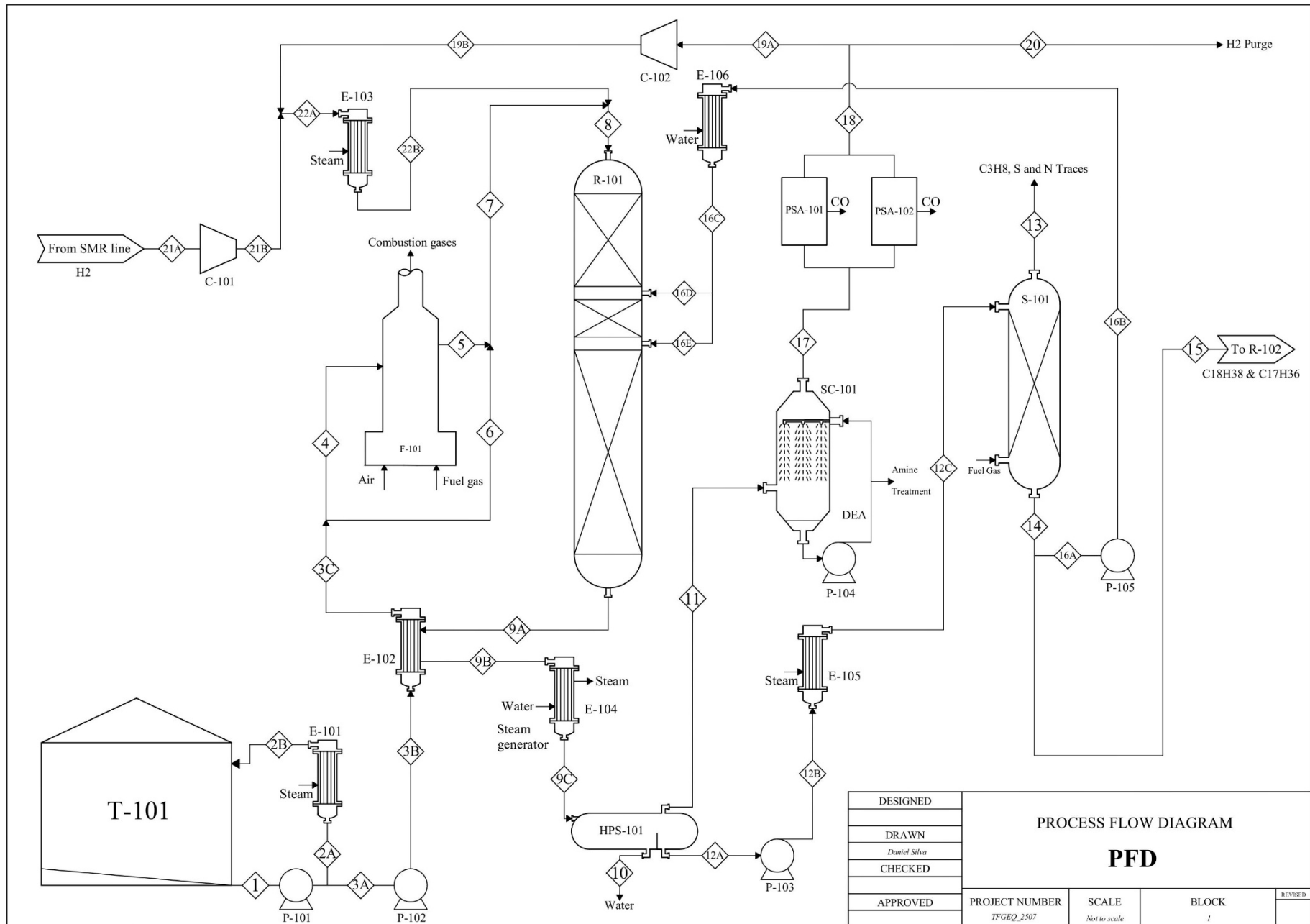


Figura 4.3. Process Flow Diagram de la secció de la planta d'hidroprocessat.

4.4 Balanç de matèria

Taula 4.2. Taula de corrents de la secció de la planta d'hidrotractament.

Components/Corrents	1	2A	2B	3A	3B	3C	4	5	6	7	8	9A	9B	9C	10	11	12A
Pressió (bar)	1	3	3	3	70	70	70	70	70	70	70	67	65	65	40	40	40
Temperatura (°C)	50	60	100	60	90	140	90	140	140	140	140	380.49	290	205.31	100	100	75
Fracció de vapor	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.08	0.90	0.28	0.12	0	1	0.99
Cabals màssics (kg/h)																	
Oli d'oliva	43,139.40	13,240.10	13,240.10	29,899.3	29,899.3	29,899.3	29,899.3*	29,899.3*	29,899.3*	29,899.3	29,899.3	-	-	-	-	-	-
H ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2,902.9	2,018.6	2,018.6	2,018.6	-	2,018.6**	-
C ₃ H ₈	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	1,489.0	1,489.0	1,489.0	-	-	1,489.0**
CO	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	947.8	947.8	947.8	-	947.8**	-
H ₂ O	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3,037.3	3,037.3	3,037.3	3,037.3	-	-
C ₁₇ H ₃₆	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	10,021.9	10,021.9	10,021.9	-	-	10,021.9**
C ₁₈ H ₃₈	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	21,085.1	21,085.1	21,085.1	-	-	21,085.1**
S	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	Traces	Traces	Traces	-	-	Traces
N	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	Traces	Traces	Traces	-	-	Traces

Taula 4.3. Taula de corrents de la secció de la planta d'hidrotractament. (Continuació)

Components/Corrents	12B	12C	13	14	15	16A	16B	16C	16D	16E	17	18	19A	19B	20	21A	21B	22A	22B
Pressió (bar)	40	40	20	20	20	20	70	70	70	70	5	5	5	70	5	-	70	70	70
Temperatura (°C)	75	100	100	100	-	100	140	50	50	50	-	-	70	100	70	-	70	90	140
Fracció de vapor	0.01	0.01	1	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Cabals màssics (kg/h)																			
Oli d'oliva	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
H ₂	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2,018.6**	2,018.6**	1,768.6	1,768.6	250.0	1,116.3	1,116.3	2,902.9	2,902.9
C ₃ H ₈	1,489.0**	1,489.0**	1,489.0**	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
CO	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	947.8**	-	-	-	-	-	-	-	-
H ₂ O	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
C ₁₇ H ₃₆	10,021.9**	10,021.9**	-	10,021.9	8,136.8	1,885.0	1,885.0	1,885.0	1160.0	725.0	-	-	-	-	-	-	-	-	-
C ₁₈ H ₃₈	21,085.1**	21,085.1**	-	21,085.1	17,125.0	3,960.2	3,960.2	3,960.2	2437.0	1523.2	-	-	-	-	-	-	-	-	-
S	Traces	Traces	Traces	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
N	Traces	Traces	Traces	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

*L'oli d'oliva s'escalfa mitjançant el forn a l'arrencada (corrent 4 i 5) o el bescanviador E-102 en estat estacionari (corrent 6).

**Aquests són cabals estimats donat una separació òptima de les separacions, ja que les operacions unitàries no han estat dissenyades i la separació de les espècies no està definida, però són necessàries per tancar el balanç de matèria.

5. CRITERIS DE DISSENY DEL REACTOR D'HIDROTRACTAMENT

En aquest apartat es presenten els criteris de disseny seguits per modelar i dissenyar el reactor d'hidrotractament. És l'únic equip del disseny conceptual dimensionat amb un gran nivell de detall, donada la importància d'aquest en el procés. Per aquest motiu, no es mostra el disseny en detall de bescanviadors, tancs, separadors, i altres equips del procés. El reactor s'ha modelat fent ús del software MATLAB®, amb l'ajuda d'ASPEN PLUS® per extreure les propietats dels compostos involucrats en el mecanisme de reacció.

5.1 Criteris generals

El reactor utilitzat en el procés d'hidrotractament (HDT) dels olis d'oliva reciclats és un reactor de llit fix de tipus *Packed-Bed*, un reactor de llit fix de càrrega continua. Aquest és un tipus de reactor amplament usat en processos de refinat de petroli i d'hidrotractament a la indústria química. Aquests reactors es caracteritzen per permetre treballar amb fases líquides i gasoses alhora. Estan constituïts per una columna vertical que conté el llit de catalitzador on té lloc la reacció entre la fase gas (hidrogen), que pot entrar en co-corrent o a contracorrent (tot i que aquest aspecte es més típic dels llits mòbils), i la fase líquida (oli d'oliva) entrant per la part superior. A l'interior del reactor, l'hidrogen es dissocia sobre els centres actius del catalitzador i aquests hidrurs reaccionen amb els triglicèrids, sempre i quan els triglicèrids s'hagin adsorbit a la superfície del catalitzador.

Donat que les reaccions que tenen lloc dins el reactor són exotèrmiques, el sistema necessita unes injeccions fredes (*quenching*) del corrent de productes heptadecà i octadecà, sent recirculats i introduïts en dos punts del reactor.

5.2 Condicions de disseny

Per tal de desenvolupar el model del reactor isotèrmic, s'han utilitzat les dades cinètiques proporcionades en l'article^[16], publicat per la Acadèmia Kiado d'Hongria. L'article descriu un mecanisme de reacció i les equacions cinètiques per a un procés d'hidrodesoxigenació (HDO) de triglicèrids utilitzant un catalitzador de níquel suportat en una base d'alúmina, Ni/Al₂O₃.

Partint de les diferències que implica l'ús de cinètiques de laboratori, com el d'un catalitzador que no és d'ús industrial, s'ha portat a terme una validació del model presentat per l'article mencionat, mitjançant una comprovació amb MATLAB®, fent ús d'un model *batch* pel reactor i comprovant el comportament de les cinètiques. Posteriorment, s'ha utilitzat un model PBR per comprovar si aquestes cinètiques són adequades pel disseny desitjat. Acomplida aquesta etapa de validació, s'ha implementat un balanç d'energia i s'han afegit aspectes de disseny per controlar la temperatura i assolir la producció anual.

A continuació, es mostren diferents taules amb les condicions inicials de la simulació del reactor d'hidrotractament amb la implementació d'estratègies de control de temperatura. A la Taula 5.1 es mostren les condicions d'operació del reactor i cabals molars inicials. A la Taula 5.2 es mostra la condició d'injecció dels diferents *quench*.

Taula 5.1. Condicions d'operació inicials per la simulació del reactor amb injecció de *quench*.

Temperatura d'entrada (K)	Pressió (bar)	Cabal inicial d'oli (olefines TG) (mol/s)	Cabal inicial d'hidrogen (mol/s)
413.15	70	9.38	400

Taula 5.2. Condicions d'injecció dels *quench* per la simulació del reactor PBR.

Nº <i>quench</i>	Cabal de <i>quench</i> (mol/s)	Temperatura del <i>quench</i>	Temperatura màxima del reactor (K)	Secció del reactor (ton cat.)
1	1.34 mol/s C + 2.66 mol/s E	323.15	648.15	27.8
2	0.84 mol/s C + 1.66 mol/s E	323.15	653.15	40.7

5.3 Simulació amb el software MATLAB®

Amb les condicions d'operació descrites anteriorment, a continuació es presenten els resultats obtinguts de la simulació. Es mostren els cabals dels diferents compostos (excepte H₂), el cabal d'hidrogen i la temperatura al llarg del reactor d'hidrotractament a la Figura 5.1, Figura 5.2 i Figura 5.3, respectivament.

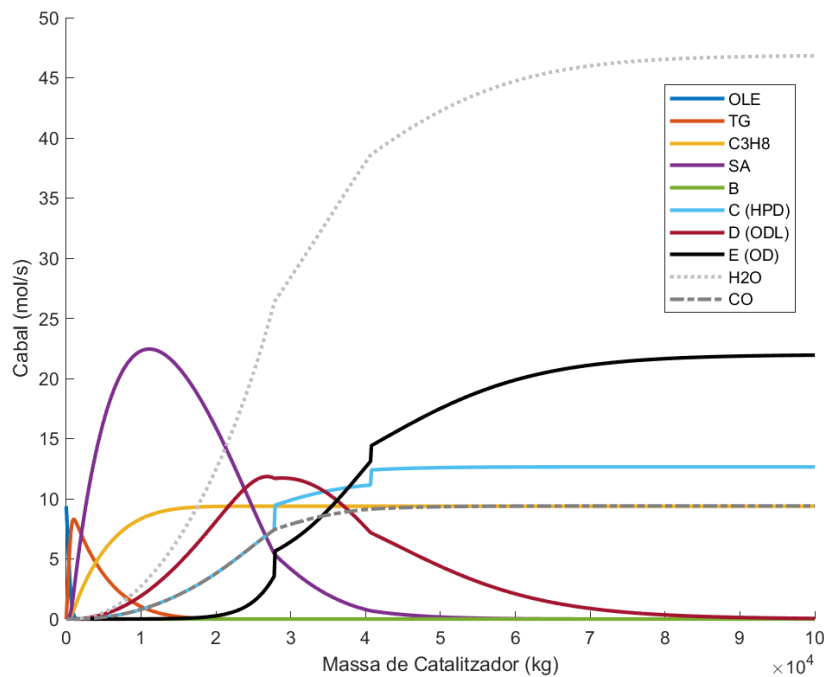


Figura 5.1. Cabals dels compostos (excepte H₂) al llarg del reactor d'hidrotractament.

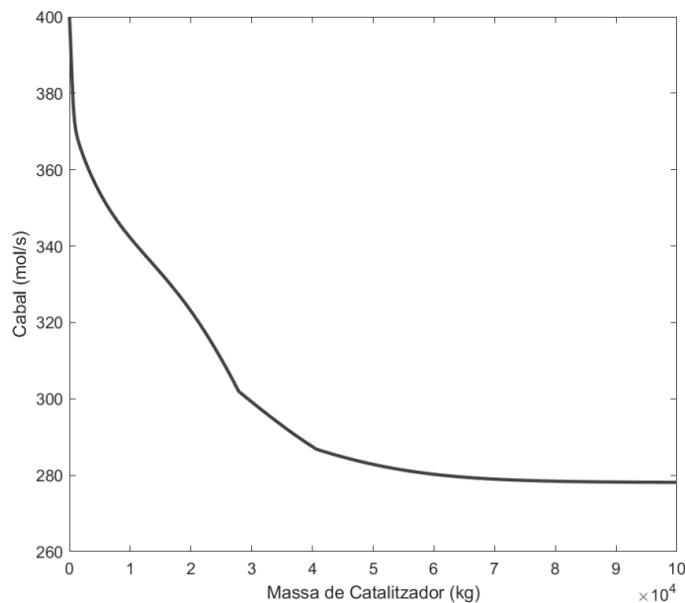


Figura 5.2. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor d'hidrotractament.

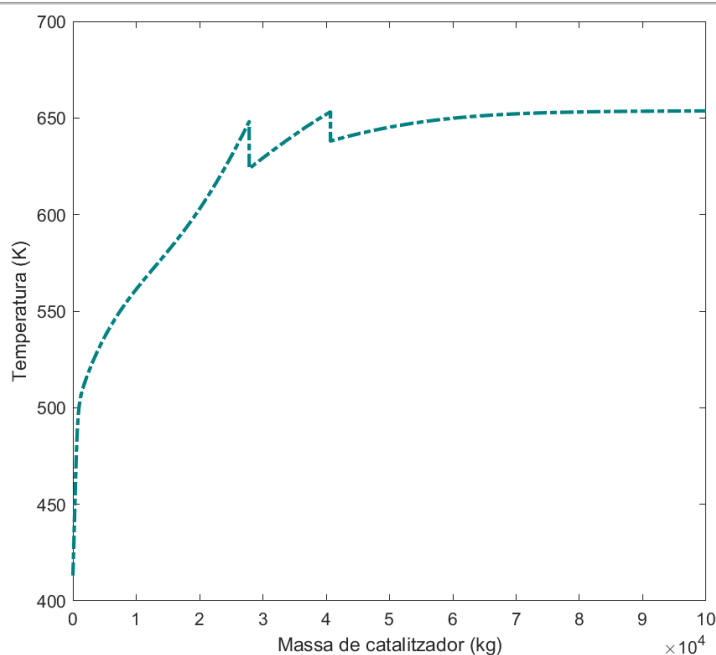


Figura 5.3. Temperatura al llarg del reactor d'hidrotractament.

Dels resultats obtinguts, es poden extreure diverses conclusions: no s'assoleix en cap moment la temperatura de degradació dels lípids (al voltant dels 400°C), es compleix la producció fixada de 200 kTA i el cabal molar necessari per les injeccions de *quen*ch és viable econòmicament i industrialment. A més a més, no hi ha àcid esteàric ni octadecanol a la sortida del reactor, aspecte molt important de cara al bon funcionament del reactor d'isomerització que es trobarà al *downstream*. Per tant, complint amb les condicions necessàries per a una correcta etapa d'hidrotractament, es porta a terme una anàlisi de sensibilitat per determinar i justificar les condicions d'operació més adequades pel reactor d'hidrotractament. Les diferents etapes del modelat del reactor, l'anàlisi de sensibilitat i els codis del software MATLAB® es troben a l'annex A.

A partir de les dades de la simulació, també s'ha determinat la WABT (*Weighted Average Bed Temperature*)^[18] o temperatura mitjana ponderada del llit catalític. Aquesta és una de les variables més utilitzades a nivell industrial per tal d'avaluar i controlar la temperatura d'operació del reactor.

La WABT permet representar una estimació de la temperatura global dins el llit, tenint en compte les reaccions exotèrmiques que generen un augment progressiu de temperatura. En l'operació del reactor és important conèixer aquest valor, ja que permet comparar el nivell catalític que poden tenir dos perfils tèrmics diferents i observar quin equival a una major temperatura general. Per altra banda, aquest valor no serveix per observar punts calents concrets a l'interior del reactor, els quals poden degradar o modificar els productes i posar en risc la seguretat (per això es necessita el perfil de temperatura detallat). Operar dins del rang de la WABT també permet assegurar una millor vida útil del catalitzador, doncs aquest es degrada amb major velocitat al treballar a temperatures més elevades de les necessàries. S'ha determinat la WABT pel cas final del reactor seguint la següent equació:

$$WABT = \sum_{i=1}^n \left(\frac{1}{3} T_i + \frac{2}{3} T_0 \right) \cdot W_i \quad (\text{E-4.1})$$

Taula 5.3. Càlcul de la WABT (*weighted average bed temperature*) a l'interior del reactor.

Llit 1			Llit 2			Llit 3			WABT (°C)
T in (°C)	T out (°C)	W (kg/kg)	T in (°C)	T out (°C)	W (kg/kg)	T in (°C)	T out (°C)	W (kg/kg)	
140.00	375.00	0.278	350.63	380.00	0.128	364.88	380.49	0.593	352.75

5.3.1 Mida, forma i disseny

El reactor consta de 3 entrades i d'una sortida de matèria per la part inferior. L'entrada ubicada a la part superior consisteix en la mescla de matèries primeres: olis d'oliva refinats i hidrogen. Les dues entrades laterals serveixen per disminuir la velocitat de reacció i la temperatura del reactor (*quench*) i es troben a la primera meitat del mateix.

Per dimensionar el reactor, s'ha utilitzat l'equació d'Ergun amb la corresponent correlació de Larkins per sistemes bifàsics, de la qual s'ha determinat la relació L/D en funció del volum de catalitzador que conté el llit del reactor i la pèrdua de càrrega calculada en cada cas. La geometria del reactor és la d'un cilindre amb capçals hemisfèrics. Després de determinar el diàmetre i la longitud del llit, s'ha determinat l'alçada dels capçals i afegit un marge de 3 metres, corresponent a l'espai necessari pels suports interns i les seccions d'injecció dels *quench*. Aquestes últimes s'han pogut dissenyar al punt exacte on havien d'entrar segons la modelització feta amb MATLAB®. Finalment, el reactor ha resultat de 17 metres d'alçada, amb un diàmetre interior de 3.49 metres. Internament, el reactor consta de diferents parts que es mostren a la Figura 5.4. El desenvolupament d'aquests càlculs es veu reflectit a l'apartat B dels annexos.

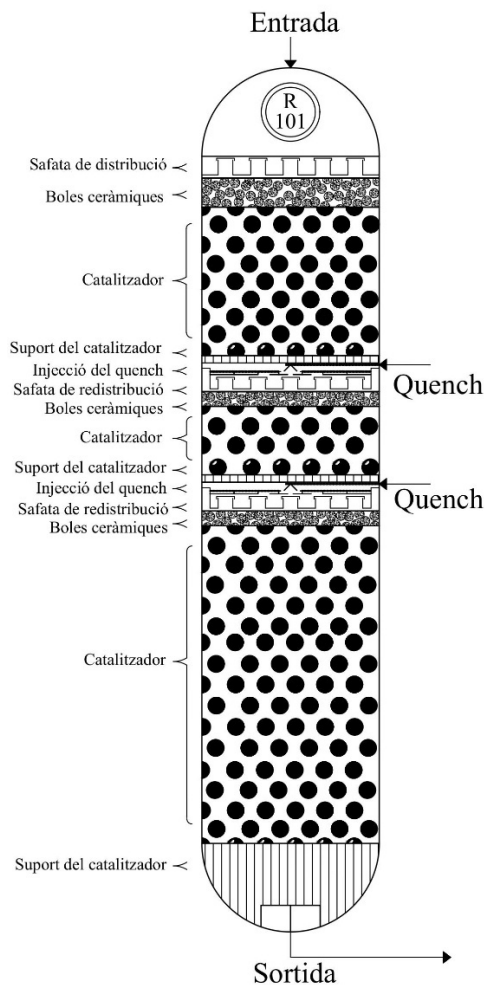


Figura 5.4. Disposició interior del reactor d'hidrotractament R-101.

1. **Safata de distribució:** una safata col·locada a la part superior, en forma de plat amb forats, per tal de distribuir bé els reactius a l'entrada
2. **Boles ceràmiques:** esferes o cilindres d'entre 3 i 5mm de diàmetre^[7], d'un material inert, que van col·locades abans del catalitzador per garantir una bona mescla entre el líquid i la zona catalitzada
3. **Suport del catalitzador:** estructura metàl·lica que subjecta les partícules del catalitzador abans de la injecció del *quench*

Per tal de determinar el gruix de xapa del reactor, s'ha utilitzat la normativa ASME, Secció VIII, divisió 1^[14]. El reactor s'ha dissenyat per aguantar pressions de fins a 81.63 barg, i una temperatura de 400 °C. Aquest està fet íntegrament de UNS K12554, un acer de baix aliatge de Mn-Mg entre altres.

Encara que els espessors obtinguts són prou raonables per la pressió a la qual està sotmès el reactor, industrialment, existeixen alternatives com l'ús d'acers més barats com un acer inoxidable 316 recobert internament per un *cladding* que eviti les soldadures entre els dos metalls. El càlcul de l'espessor del reactor d'hidrotractament es troba desenvolupat a l'annex B.

Altrament, s'ha dut a terme una estimació del cost econòmic del reactor d'hidrotractament mitjançant la metodologia descrita al *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes*, cinquena edició, de Richard Turton^[19]. Per la realització de l'estimació del cost, només s'ha tingut en compte el cost de l'equip, ajustat a la pressió de treball i al material del qual està fet. A l'annex C es pot seguir el procediment de càlcul. El resultat final del cost ha estat el següent:

Taula 5.4. Valors finals dels costos dels diferents equips.

Equip	CBM 2024 (€)
R-101	10,500,000

6. LLISTAT D'EQUIPS

A continuació, es mostra una taula resum de tots els equips de processos per a la primera secció de la planta, així com una estimació de les seves condicions d'operació i disseny.

Pel que fa als tancs d'emmagatzematge API, T-101 a T-104, s'ha estimat el seu volum en funció del consum de matèria primera de la planta. Mantinent un *stock* de dues setmanes, aproximadament 10,000 tones.

Taula 6.1. Llistat d'equips de la primera secció del procés d'hidrotractament.

Equip	Tipus	Volum (m ³)	T. Operació (°C)	P. Operació (barg)	T. Disseny (°C)	P. Disseny (barg)
T-101 a T-104	Tancs emmagatzematge d'oli	3000	50	1	125	1.5
E-101	Bescanviador	0.5	100	1	125	6
E-102	Bescanviador	1	380.49	70	400	80
E-103	Bescanviador	0.3	140	70	165	80
E-104	Bescanviador	2.6	290	50	325	60
E-105	Bescanviador	0.3	120	60	145	70
E-106	Bescanviador	0.6	150	50	175	60
F-101	Forn	N.D.	300	-	350	-
R-101	Reactor HDT	150	380	70	400	81.63
HPS-101	<i>High Pressure Separator</i>	N.D.	120	40	145	50
SC-101	<i>Scrubber</i>	N.D.	-	5	-	8
S-101	<i>Stripper</i>	N.D.	100	50	125	60
PSA-101	<i>Pressure-swing adsorption</i>	N.D.	-	-	-	-
PSA-102	<i>Pressure-swing adsorption</i>	N.D.	-	-	-	-
C-101	Compressor	N.D.	70	70	95	80
C-102	Compressor	N.D.	100	70	125	75
P-101	Bomba	N.D.	50	1	75	6
P-102	Bomba	N.D.	90	70	115	75
P-103	Bomba	N.D.	75	40	100	45
P-104	Bomba	N.D.	90	40	115	45
P-105	Bomba	N.D.	140	70	165	75

*N.D: No dimensionat.

7. CONSUM DE SERVEIS AUXILIARS

Al llarg d'aquest capítol s'esmenten els requeriments de les xarxes de servei auxiliars pel correcte funcionament per aquesta secció de la planta d'hidrotractament. L'abast d'aquests càlculs només engloba la xarxa de bescanviadors plantejada, sense tenir en compte altres equips de bescanvi de calor com per exemple forns. Es tracta d'una estimació del consum de la xarxa d'*utilities* realitzada amb el software *ASPEN Exchanger, Desing & Rating*®. Cal recordar que la integració energètica del procés no es troba dins de l'abast del projecte i, per tant, no s'ha fet ús de metodologies d'integració com la metodologia *pinch*.

7.1 Consum de heaters

Taula 7.1. Dades del bescanvi de calor pel *heater* E-101.

Variable	Costat tubs (procés)	Costat carcassa (<i>steam</i>)
T. d'entrada (°C)	60.00	143.61
T. de sortida (°C)	100.00	140.81
Pressió (bar)	3	4
Cabal (kg/h)	13,240	499
Calor bescanviada (kW)		297.4

Taula 7.2. Dades del bescanvi de calor pel *heater* E-103.

Variable	Costat tubs (procés)	Costat carcassa (<i>steam</i>)
T. d'entrada (°C)	90.00	263.94
T. de sortida (°C)	140.00	263.44
Pressió (bar)	70	50
Cabal (kg/h)	2,903	1,288
Calor bescanviada (kW)		587.5

Taula 7.3. Dades del bescanvi de calor pel *heater* E-105.

Variable	Costat tubs (procés)	Costat carcassa (<i>steam</i>)
T. d'entrada (°C)	75.00	263.94
T. de sortida (°C)	100.00	263.56
Pressió (bar)	65	50
Cabal (kg/h)	32,596	1,101
Calor bescanviada (kW)		502.2

7.2 Consum de coolers

Taula 7.4. Dades del bescanvi de calor pel *boiler* E-104.

Variable	Costat tubs (procés)	Costat carcassa (aigua de caldera)
T. d'entrada (°C)	290.00	50.00
T. de sortida (°C)	205.31	200.53
Pressió (bar)	40	15
Cabal (kg/h)	38,647	4,869
Calor bescanviada (kW)		-3,500

Taula 7.5. Dades del bescanvi de calor pel *cooler* E-106.

Variable	Costat tubs (procés)	Costat carcassa (<i>cooling water</i>)
T. d'entrada (°C)	140.00	30.00
T. de sortida (°C)	50.00	40.00
Pressió (bar)	70	15*
Cabal (kg/h)	5,845	28,514*
Calor bescanviada (kW)		-326.3

*Pressió perillosament baixa al costat carcassa i consum de *cooling water* excessiu.

7.3 Conclusions de l'estimació de *utilities*

El resultat de l'estimació del consum d'*utilities* de la secció de la planta d'hidrotractament conclou que hi ha un *surplus* energètic de **-2,439 kW**, corresponent al consum net d'energia tèrmica aportada pels serveis auxiliars. Aquest valor s'ha obtingut considerant exclusivament el consum d'*utilities* pels bescanviadors de calor. Hi ha operacions com la del forn F-101 (que té com a objectiu escalfar l'oli d'oliva refinat fins a uns 250-270°C) que estan limitades a fases transitòries de *start-up* o que directament es troben fora de l'abast del projecte. Aquestes, juntament amb l'*stripper* S-101, causarien una disminució considerable en aquest *surplus* energètic.

Aquest valor és elevat perquè, malgrat haver-hi una necessitat per escalfar les matèries primes a les condicions d'operació adients, es tracta d'un procés altament exotèrmic en el qual el *downstream* del reactor d'hidrotractament té un cabal de 38,546 kg/h a 380°C de temperatura. Aquest corrent ha de ser refredat considerablement i, per aquest motiu, s'ha considerat la possibilitat de produir vapor a partir del seu calor residual, com és el cas de l'E-104. Els 4,869 kg/h d'aigua de caldera que requereix el bescanvi E-104 acaba sent vapor saturat a 15 bar, aprofitable per altres zones de la planta. A més a més, s'ha considerat canviar l'ordre dels bescanvis per produir més vapor i de millor qualitat i optimitzar els bescanvis plantejats (primer un *Steam generator* i després el creuament de corrents).

El bescanviador més ineficient és l'E-106, el qual utilitza 28,514 kg/h de *cooling water* sense produir cap mena de vapor, amb un bescanvi poc òptim en termes operacionals. A causa de les condicions d'operació del corrent de procés (70 bar i 140°C), se sap que és impossible produir vapor. Tanmateix, l'ús d'un bescanviador de calor de tubs i carcassa per aquesta aplicació no és el més adient. Hi ha alternatives viables com bescanviadors de plaques o aerorefrigerants amb aigua.

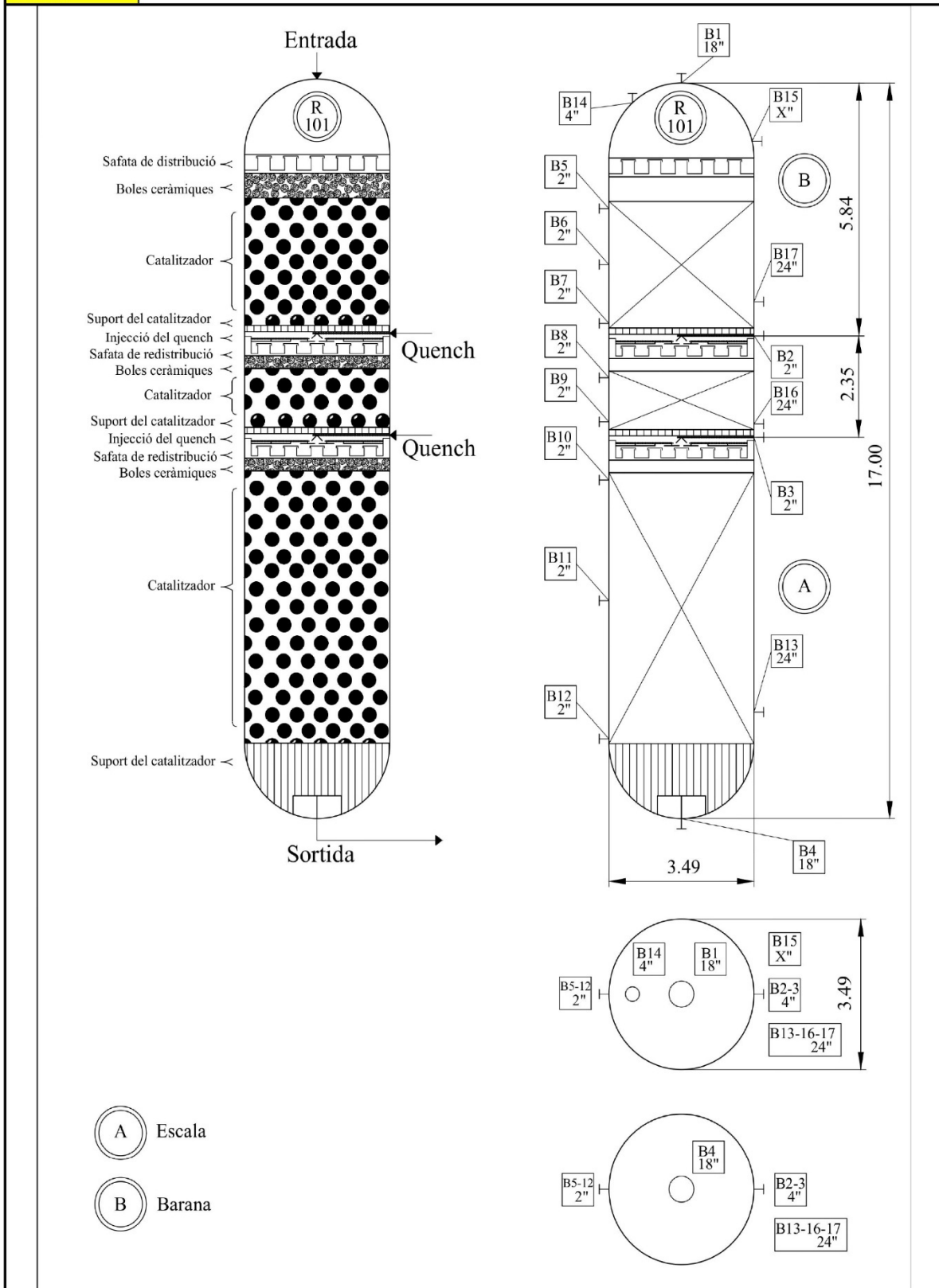
Per maximitzar l'eficiència tèrmica i la del consum de servei auxiliars de la planta, s'han considerat un seguit d'alternatives per apropar el màxim possible aquest *surplus* energètic a 0 kW:

- Implementació d'una metodologia d'integració energètica de processos. Per exemple, la metodologia d'anàlisi *pinch*, on es detecten creuaments tèrmics viables entre corrents fredes i calentes per minimitzar l'ús de *utilities* externes i aprofitar el calor residual. Aquesta es podria fer, per exemple, amb el software ASPEN PLUS® si fos possible l'elaboració d'una simulació de la planta, el qual disposa de l'eina *Aspen Energy Analyzer*
- Ajust dels *set-points* de les operacions unitàries per evitar extreure més calor del necessari i reduir el consum innecessari d'aigua de refrigeració
- Realitzar el refredament del *downstream* del reactor R-101 en diferents etapes amb menor decrement de temperatura, per minimitzar el cabal d'aigua amb un aprofitament de calor més adequat. Malgrat això, aquesta aigua de caldera serveix per produir vapor saturat a 15 bar, útil per altres aspectes de la planta. Per altra banda, el corrent de *quench* es pot refredar en múltiples etapes per minimitzar l'ús de *cooling water*, però aquesta no s'aprofita com a vapor posteriorment. En el cas de la refrigeració del *quench* es pot considerar una tècnica diferent que aconseguixi aquest bescanvi

8. FITXA D'ESPECIFICACIÓ DEL REACTOR

PROJECTE		TFGEQ_2507		ESPECIFICACIÓ		Nº	1		
EMPRESA		ETSEQ		Reactor		FULL Nº	1 de 2		
FÀBRICA				ETSEQ		DATA	01/05/2025		
PLANTA		Secció HDT				PREPARAT	01/05/2025		
ÍTEM		R-101				REVISAT	03/06/2025		
SERVEI						APROBAT	06/06/2025		
						Nº UNITATS	1		
OPERACIÓ	DESCRIPCIÓ	Reactor d'hidrotractament, HDT, per a la producció de biocombustibles a partir d'olis reciclats							
	PRODUCTE	Al reactor entra oli d'oliva i H2 i es produeix C3H8, CO, H2O, C17H36, C18H38							
	CABAL D'ENTRADA	761.31	m3/h						
	CABAL DE SORTIDA	1,004.44	m3/h						
	TEMPERATURA	380	°C						
	PRESSIÓ	70	bar						
TIPOS	TANC	Cilíndric							
	SOSTRE	Hemisfèric							
	FONS	Hemisfèric							
CONSTRUCCIÓ	DIMENSIONS	DIÀMETRO	3.49	m	DISSENY I PROVA	CONDICIONS DE DISSENY	TEMPERATURA	400	°C
		LONG. / ALT.	17.00	m			PRESSIÓ	81.63	barg
		ESPESSOR	63.50	mm		DENSITAT	675	kg/m3	
	FONS	SUPERIOR	31.80	mm		PRESIÓ DE PROVA	HIDRÀULICA	106.11	barg
		INFERIOR	31.80	mm			PNEUMÀTICA	-	barg
	VOL. / PES	VOL. TOTAL	150.89	m3		ESPESSOR DE CORROSIÓ	1	mm	
		PESO	84,929	kg		EFICACIA DE SOLDADURA	0.85		
	INSTAL·LACIÓ	Skirt support (vertical)				RADIOGRAFIAT	Parcial		
	AÏLLAMENT	Llana de roca							
	MATERIALS			DESCRIPCIÓ		COMENTARIS			
COS		UNS K12554		El reactor és un <i>Trickle-bed</i> , reactor de degoteig, de llit fix. Per tal de controlar la temperatura d'operació, el reactor disposa de dues recirculacions fredes (<i>quench</i>) de producte. Internament, el reactor compta amb dues caixes per on es fan les injeccions del <i>quench</i> . A més, hi ha tres plats de distribució, un a l'inici i la resta després de les injeccions, així com suports interns d'UNS K12554 per tal de suportar el catalitzador i el material l'inert.					
TAPA/FONS		UNS K12554							
BRIDES COS		-							
VALONA BRIDES COS		-							
BRIDES TUBULADURES		UNS K12554							
TUBULADURES		UNS K12554							
PLACA PARTICIÓ		-							
CORTACORRENTS		-							
SUPORT PER INTERNS		UNS K12554							
CARGOLS/FEMELLES INT.		UNS K12554							
CARGOLS/FEMELLES EXTER.		UNS K12554							
JUNTES INTERIOR		Grafit expandit							
JUNTES EXTERNES		Grafit expandit							
SUPORTS EXTERIORS		UNS K12554							
TUBULADURES	MARCA	QUANT.	SERVEI		D.N.	RATING			
	B1	1	Tubuladura entrada (línea P-1008)		18"				
	B2	1	Tubuladura <i>quench</i> 1 (línea P-1016D)		2"				
	B3	1	Tubuladura <i>quench</i> 2 (línea P-1016E)		2"				
	B4	1	Tubuladura sortida (línea P-1009A)		18"				
	B5	1	Tubuladura transmissor temperatura TT-1008		2"				
	B6	1	Tubuladura transmissor temperatura TT-1009		2"				
	B7	1	Tubuladura transmissor temperatura TT-1010		2"				
	B8	1	Tubuladura transmissor temperatura TT-1011		2"				
	B9	1	Tubuladura transmissor temperatura TT-1012		2"				
	B10	1	Tubuladura transmissor temperatura TT-1013		2"				
	B11	1	Tubuladura transmissor temperatura TT-1014		2"				
	B12	1	Tubuladura transmissor temperatura TT-1015		2"				
	B13	1	Boca d'home lateral		24"				
	B14	1	Espera		4"				
	B15	1	Tubuladura PSV-101		X				
	B16	1	Boca d'home lateral		24"				
B17	1	Boca d'home lateral		24"					
ANNOTACIONS	Els transmissors de temperatura marcats van quadruplicats, per tal d'assegurar una mesura de la temperatura de forma radial completa al llarg del reactor, al full només s'especifica un costat								
	El transmissor de temperatura TT-1007 i TT-1016 van inclosos en les tubuladures B1 i B4 respectivament								

PROJECTE	TFGEQ_2507	ESPECIFICACIÓN	Nº	1
EMPRESA	ETSEQ		FULL Nº	2 de 2
FÀBRICA			DATA	01/05/2025
PLANTA	Secció HDT	EMPRESA	PREPARAT	01/05/2025
ITEM	R-101		REVISAT	03/06/2025
SERVEI			APROBAT	06/06/2025
			Nº UNITATS	1



9. LLISTAT DE CANONADES

Taula 9.1. Llistat de canonades de la primera secció del procés d'hidrotractament.

Línia	NPS (in)	Gruix (mm)	Des de	Fins	Fluid	Estat	T. Op (°C)	P. Op (barg)	T. Diss. (°C)	P. Disseny (barg)	SCH	Material	Aïllant
P-1001	4	0	T-101	P-101	Oli	Líq	50	1	75	2.5	40	S31603	Si
P-1002A	4	1	P-101	E-101	Oli	Líq	60	3	85	5	40	S31603	Si
P-1002B	4	1	E-101	T-101	Oli	Líq	60	3	85	5	40	S31603	Si
P-1002C	4	1	E-101	T-101	Oli	Líq	100	3	125	5	40	S31603	Si
P-1003A	4	1	P-101	P-102	Oli	Líq	60	3	85	5	40	S31603	Si
P-1003B	6	21	P-102	E-102	Oli	Líq	90	70	115	80	XXS	S31603	Si
P-1003C	6	21	E-102	P-1004, P-1006	Oli	Líq	140	70	165	80	XXS	S31603	Si
P-1004	6	21	P-1003C	F-101	Oli	Líq	90	70	115	80	XXS	S31603	Si
P-1005	6	21	F-101	P-1007	Oli	Líq	140	70	165	80	XXS	S31603	Si
P-1006	6	21	P-1003C	P-1005	Oli	Líq	140	70	165	80	XXS	S31603	Si
P-1007	6	21	P-1005, P-1006	R-101	Oli	Líq	140	70	165	80	XXS	S31603	Si
P-1008	18	58	P-1007, P-10019B	R-101	Oli, H ₂	Gas-Líq	140	70	165	80	160	S31603	Si
P-1009A	18	43	R-101	E-102	Tot	Gas-Líq	380.49	67	405.49	77	100	S31603	Si
P-1009B	18	42	E-102	E-104	Tot	Gas-Líq	290	65	315	75	100	S31603	Si
P-1009C	16	29	E-104	HPS-101	Tot	Gas-Líq	120	40	145	50	140	S31603	Si
P-1010	4	9	HPS-101	Treatment	H ₂ O	Líq	100	40	125	50	120	S31603	Si
P-1011	4	9	HPS-101	SC-101	H ₂ ,CO	Gas	100	40	125	50	120	S31603	Si
P-1012A	6	14	HPS-101	P-103	Alcans, Propà, S y N	Gas-Líq	75	40	100	50	120	S31603	Si
P-1012B	6	14	P-103	E-105	Alcans, Propà, S y N	Gas-Líq	75	40	100	50	120	S31603	Si
P-1012C	6	14	E-105	S-101	Alcans, Propà, S y N	Gas-Líq	100	40	125	50	120	S31603	Si
P-1013	4	6	S-101	Treatment	Propà, S y N	Gas	100	20	125	30	120	S31603	Si
P-1014	4	6	S-101	P-1016A, P-1015	Alcans	Líq	100	20	125	30	120	S31603	Si
P-1015	4	6	P-1014, P-1016A	R-102	Alcans	Líq	-	20		30	120	S31603	Si
P-1016A	2	3	S-101	P-105	Alcans	Líq	100	20	125	30	120	S31603	Si
P-1016B	2	8	P-105	E-106	Alcans	Líq	140	70	165	80	80s	S31603	Si

Taula 9.2. Llistat de canonades de la primera secció del procés d'hidrotractament. (Continuació)

Línia	NPS (in)	Gruix (mm)	Des de	Fins	Fluid	Estat	T. Op (°C)	P. Op (barg)	T. Diss. (°C)	P. Disseny (barg)	SCH	Material	Aïllant
P-1016C	2	8	E-106	P-1016D, P-1016E	Alcans	Líqu	50	70	75	80	80s	S31603	Si
P-1016D	2	8	P-1016C	R-101	Alcans	Líqu	50	70	75	80	80s	S31603	Si
P-1016E	2	8	P-1016C	R-101	Alcans	Líqu	50	70	75	80	80s	S31603	Si
P-1017	4	2	SC-101	PSA-101	H ₂ , CO	Gas	-	5	-	8	40	S31603	Si
P-1018	4	2	PSA-101	P-1019A, P-1020	H ₂	Gas	-	5	-	8	40	S31603	Si
P-1019A	4	2	P-1018, P-1020	C-102	H ₂	Gas	70	5	95	8	120	S31603	Si
P-1019B	4	14	C-102	P-1022A, P-1021A	H ₂	Gas	100	70	125	80	120	S31603	Si
P-1020	4	2	P-1019A, P-1018	<i>Treatment</i>	H ₂	Gas	70	5	95	8	80	S31603	Si
P-1021A	4	-	<i>SMR Line</i>	C-101	H ₂	Gas	-	-	-	-	120	S31603	Si
P-1021B	4	14	C-101	P-1022A, P-1019B	H ₂	Gas	70	70	95	80	120	S31603	Si
P-1022A	4	14	P-1019B, P-1021B	E-103	H ₂	Gas	90	70	115	80	120	S31603	Si
P-1022B	4	14	E-103	P-108	H ₂	Gas	140	70	165	80	120	S31603	Si

10.LLISTAT D'INSTRUMENTACIÓ

Taula 10.1. Llistat d'instrumentació del P&ID-101.

Instrument	Línia / Equip	Producte	Senyal	Tipus d'unió	Descripció	Tipus	Material	Diàmetre (in)	Fase	T. Operació (°C)	P. Operació (bar)
PT-1005	P-1008, P-1009A	Oli, H ₂ , Alcans, C ₃ H ₈ , CO	AI	Bridada	Mesurador de pressió	Piezoelèctric	S31603	2	Líquid i gas	140	70
TT-1007	R-101	Oli, H ₂ , Alcans, C ₃ H ₈ , CO	AI	Bridada	Mesurador de temperatura	Termorresistència	S31603	2	Líquid i gas	380	70
TT-1008	R-101	Oli, H ₂ , Alcans, C ₃ H ₈ , CO	AI	Bridada	Mesurador de temperatura	Termorresistència	S31603	2	Líquid i gas	380	70
TT-1009	R-101	Oli, H ₂ , Alcans, C ₃ H ₈ , CO	AI	Bridada	Mesurador de temperatura	Termorresistència	S31603	2	Líquid i gas	380	70
TT-1010	R-101	Oli, H ₂ , Alcans, C ₃ H ₈ , CO	AI	Bridada	Mesurador de temperatura	Termorresistència	S31603	2	Líquid i gas	380	70
TT-1011	R-101	Oli, H ₂ , Alcans, C ₃ H ₈ , CO	AI	Bridada	Mesurador de temperatura	Termorresistència	S31603	2	Líquid i gas	380	70
TT-1012	R-101	Oli, H ₂ , Alcans, C ₃ H ₈ , CO	AI	Bridada	Mesurador de temperatura	Termorresistència	S31603	2	Líquid i gas	380	70
TT-1013	R-101	Oli, H ₂ , Alcans, C ₃ H ₈ , CO	AI	Bridada	Mesurador de temperatura	Termorresistència	S31603	2	Líquid i gas	380	70
TT-1014	R-101	Oli, H ₂ , Alcans, C ₃ H ₈ , CO	AI	Bridada	Mesurador de temperatura	Termorresistència	S31603	2	Líquid i gas	380	70
TT-1015	R-101	Oli, H ₂ , Alcans, C ₃ H ₈ , CO	AI	Bridada	Mesurador de temperatura	Termorresistència	S31603	2	Líquid i gas	380	70
TT-1016	R-101	Oli, H ₂ , Alcans, C ₃ H ₈ , CO	AI	Bridada	Mesurador de temperatura	Termorresistència	S31603	2	Líquid i gas	380	70
FT-1018	P-1016D	H ₂	AI	Bridada	Mesurador de cabal	Coriolis	S31603	2	Gas	50	70
FT-1019	P-1016E	H ₂	AI	Bridada	Mesurador de cabal	Coriolis	S31603	3	Gas	50	70

Taula 10.2. Llistat d'instrumentació del P&ID-101. (Continuació)

Instrument	Línia / Equip	Producte	Senyal	Tipus d'unió	Descripció	Tipus	Material	Diàmetre (in)	Fase	T. Operació (°C)	P. Operació (bar)
FT-1004	P-1003B	Olis	AI	Bridada	Mesurador de cabal	Coriolis	S31603	3	Líquid	90	70
JT-1002	MP-102	-	AI	-	Mesurador de potència	-	-	2	-	-	-
FFC-1000	-	-	-	-	<i>Feedforward calculator</i>	-	-	-	-	-	-
FC-1004	P-1007	-	AI	-	Regulador de cabal	-	-	-	-	-	-
FC-1018	P-1016D	-	AI	-	Regulador de cabal	-	-	-	-	-	-
FC-1019	P-1016E	-	AI	-	Regulador de cabal	-	-	-	-	-	-
PC-1005	P-1022B, P-1009A	-	AI	-	Regulador de pressió	-	-	-	-	-	-
JC-1003	MP-102	-	AI	-	Regulador de potència	-	-	-	-	-	-

11. SISTEMA D'ENCLAVAMENTS

En aquest capítol s'expliquen els diferents enclavaments (*interlocks*) que s'han implementat a partir de l'anàlisi Hazop per garantir la seguretat del procés i la integritat de la planta. Un enclavament és un sistema de control automàtic que evita condicions d'operació no desitjades o perilloses, aturant o modificant el funcionament dels equips quan es compleixen certes condicions preestablertes. Aquest sistema d'enclavaments està directament relacionat amb el Hazop mencionat, el qual s'ha elaborat a partir del P&ID del reactor d'hidrotractament (apartat 12). No engloba tota la secció del disseny conceptual de la planta d'hidrotractament.

El primer enclavament s'activa quan, per qualsevol raó, apareixen productes intermedis que no acaben de reaccionar i poden obturar el reactor, fent augmentar la pressió amb una possibilitat de ruptura catastròfica. En aquests casos s'activa l'enclavament i, si aquest és insuficient per alleujar l'alta pressió dintre el reactor i des de sala de control ja no es pot fer res per revertir la situació, entrarien en funcionament les PSV dissenyades. Aquest enclavament aturarà el bombeig d'oli i obrirà la línia de neteja *from product* que s'emportarà tots els intermedis del reactor i, un cop surtin de l'*stripper*, aniran a parar a un tanc de productes *off-spec*.

El segon cas s'activa en detectar-se una temperatura superior a la permesa a l'interior del reactor (al voltant dels 400°C), podent arribar a un risc de *runaway* tèrmic. Com a mesura de seguretat, el sistema compta amb un enclavament SIL 3, el qual limita el flux de combustible al forn, talla directament l'entrada de reactius al reactor o fa saltar els sistemes de *quench* en funció de la gravetat. Igual que anteriorment, una PSV allibera la pressió que pugui aparèixer pel fet de l'augment de la temperatura. A l'annex E es mostra la taula de l'anàlisi *Hazop* realitzat per la zona del reactor R-101, corresponent al P&ID-101.

12. DIAGRAMA DE CANONADES I INSTRUMENTACIÓ DEL REACTOR D'HIDROTRACTAMENT

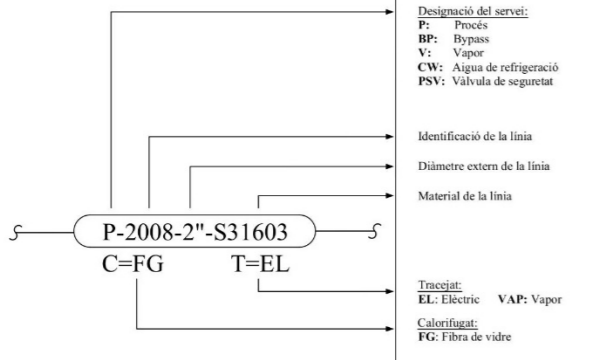
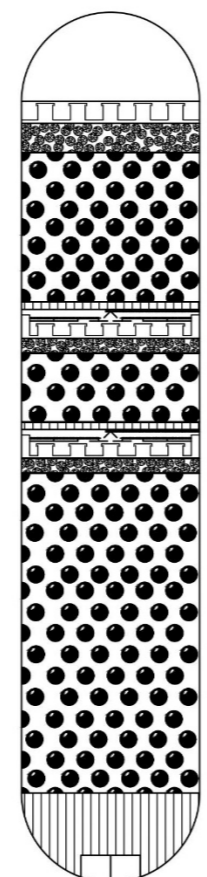
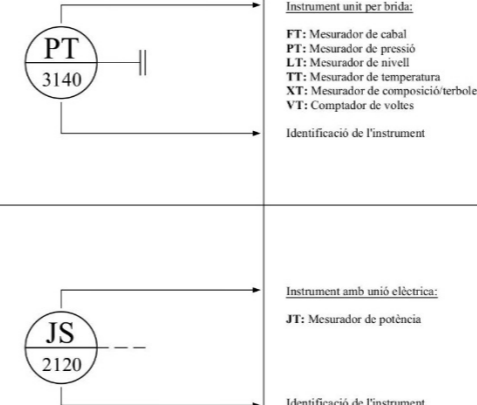
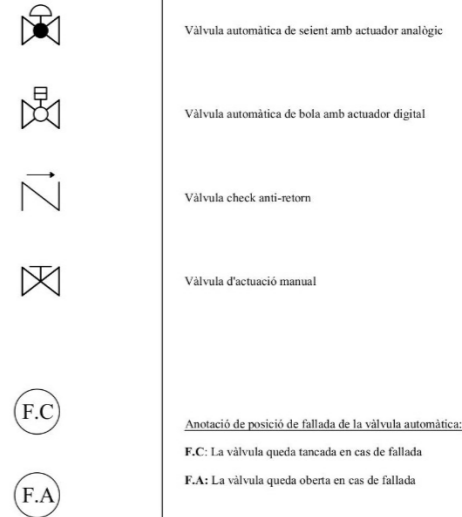
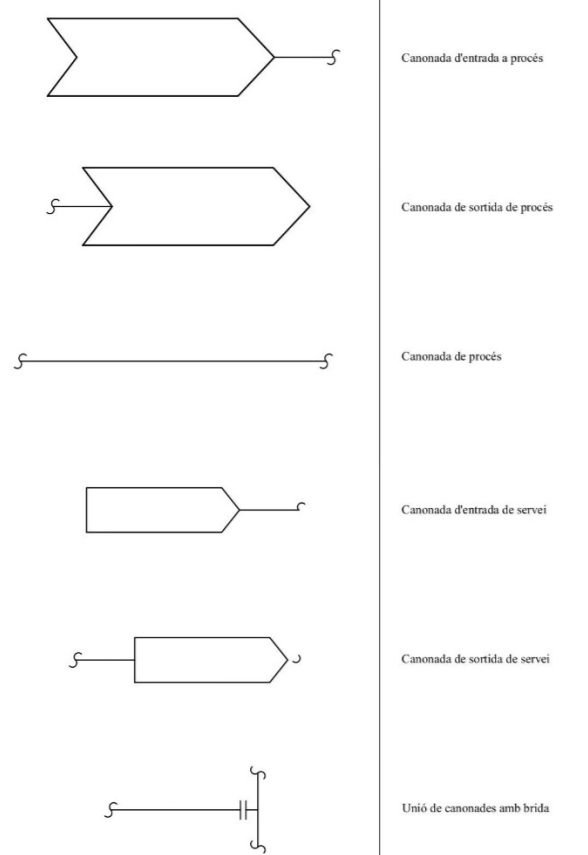
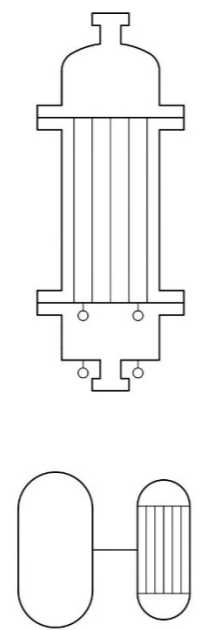
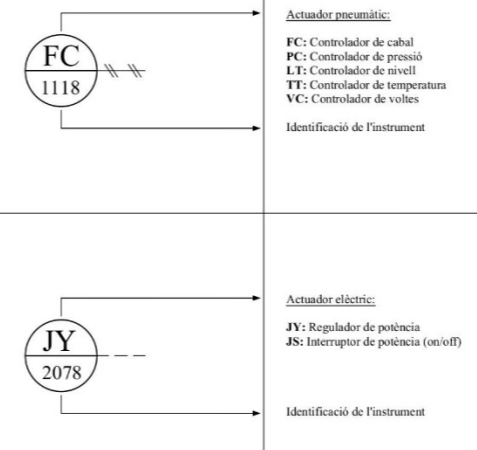

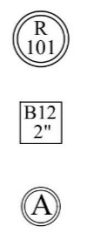
IDENTIFICACIÓ DE CANONADES	EQUIPS	INSTRUMENTACIÓ I CONTROL	VÀLVULES																	
 <p>Designació del servei: P: Procés BP: Bypass V: Vapor CW: Aigua de refrigeració PSV: Vàlvula de seguretat</p> <p>Identificació de la línia Diàmetre extern de la línia Material de la línia</p> <p>Tracejat: EL: Elèctric VAP: Vapor Calorífugat: FG: Fibra de vidre</p>																				
<p>CANONADES</p>	 <p>Reactor tubular empacat d'hidrotractament</p>	 <p>Instrument unit per brida: FT: Mesurador de cabal PT: Mesurador de pressió LT: Mesurador de nivell TT: Mesurador de temperatura XT: Mesurador de composició/terbolesa VT: Comptador de voltes</p> <p>Identificació de l'instrument</p> <p>Instrument amb unió elèctrica: JT: Mesurador de potència</p> <p>Identificació de l'instrument</p>	 <p>Vàlvula automàtica de seient amb actuator analògic</p> <p>Vàlvula automàtica de bola amb actuator digital</p> <p>Vàlvula check anti-retorn</p> <p>Vàlvula d'actuació manual</p> <p><u>Anotació de posició de fallada de la vàlvula automàtica:</u> F.C: La vàlvula queda tancada en cas de fallada F.A: La vàlvula queda oberta en cas de fallada</p>																	
 <p>Canonada d'entrada a procés</p> <p>Canonada de sortida de procés</p> <p>Canonada de procés</p> <p>Canonada d'entrada de servei</p> <p>Canonada de sortida de servei</p> <p>Unió de canonades amb brida</p>		 <p>Bescanviador de calor de tubs i carcassa</p> <p>Bomba centrífuga amb motor</p>	 <p>Actuator pneumàtic: FC: Controlador de cabal PC: Controlador de pressió LT: Controlador de nivell TT: Controlador de temperatura VC: Controlador de voltes</p> <p>Identificació de l'instrument</p> <p>Actuator elèctric: JY: Regulador de potència JS: Interruptor de potència (on/off)</p> <p>Identificació de l'instrument</p> <p>Ordre o senyal: AI: Entrada analògica AO: Sortida analògica DI: Entrada digital DO: Sortida digital</p> <p>Identificació de la senyal</p>	<p style="text-align: center;">VÀLVULES DE SEGURETAT</p>  <p>Pressure Safety Valve (PSV)</p> <p style="text-align: center;">ANOTACIONS</p>  <p>Identificació del tipus i número de l'equip</p> <p>Nom i diàmetre d'embocadura de l'equip</p> <p>Anotació aclaratòria a peu del diagrama</p> <table border="1" data-bbox="2089 1774 2694 1953"> <tr> <td>DESIGNED</td> <td colspan="3" rowspan="3" style="text-align: center;">PIPING & INSTRUMENTATION DIAGRAM</td> <td rowspan="3" style="text-align: center;">KEY</td> </tr> <tr> <td>DRAWN</td> </tr> <tr> <td><i>Marian Alexandra Gavril</i></td> </tr> <tr> <td>CHECKED</td> <td>PROJECT NUMBER</td> <td>SCALE</td> <td>BLOCK</td> <td>REVISED</td> </tr> <tr> <td>APPROVED</td> <td>TPGEQ_2507</td> <td>Not to scale</td> <td>1</td> <td></td> </tr> </table>	DESIGNED	PIPING & INSTRUMENTATION DIAGRAM			KEY	DRAWN	<i>Marian Alexandra Gavril</i>	CHECKED	PROJECT NUMBER	SCALE	BLOCK	REVISED	APPROVED	TPGEQ_2507	Not to scale	1
DESIGNED	PIPING & INSTRUMENTATION DIAGRAM			KEY																
DRAWN																				
<i>Marian Alexandra Gavril</i>																				
CHECKED	PROJECT NUMBER	SCALE	BLOCK	REVISED																
APPROVED	TPGEQ_2507	Not to scale	1																	

Figura 12.1. Nomenclatura del diagrama de canonades i instrumentació del reactor d'hidrotractament.

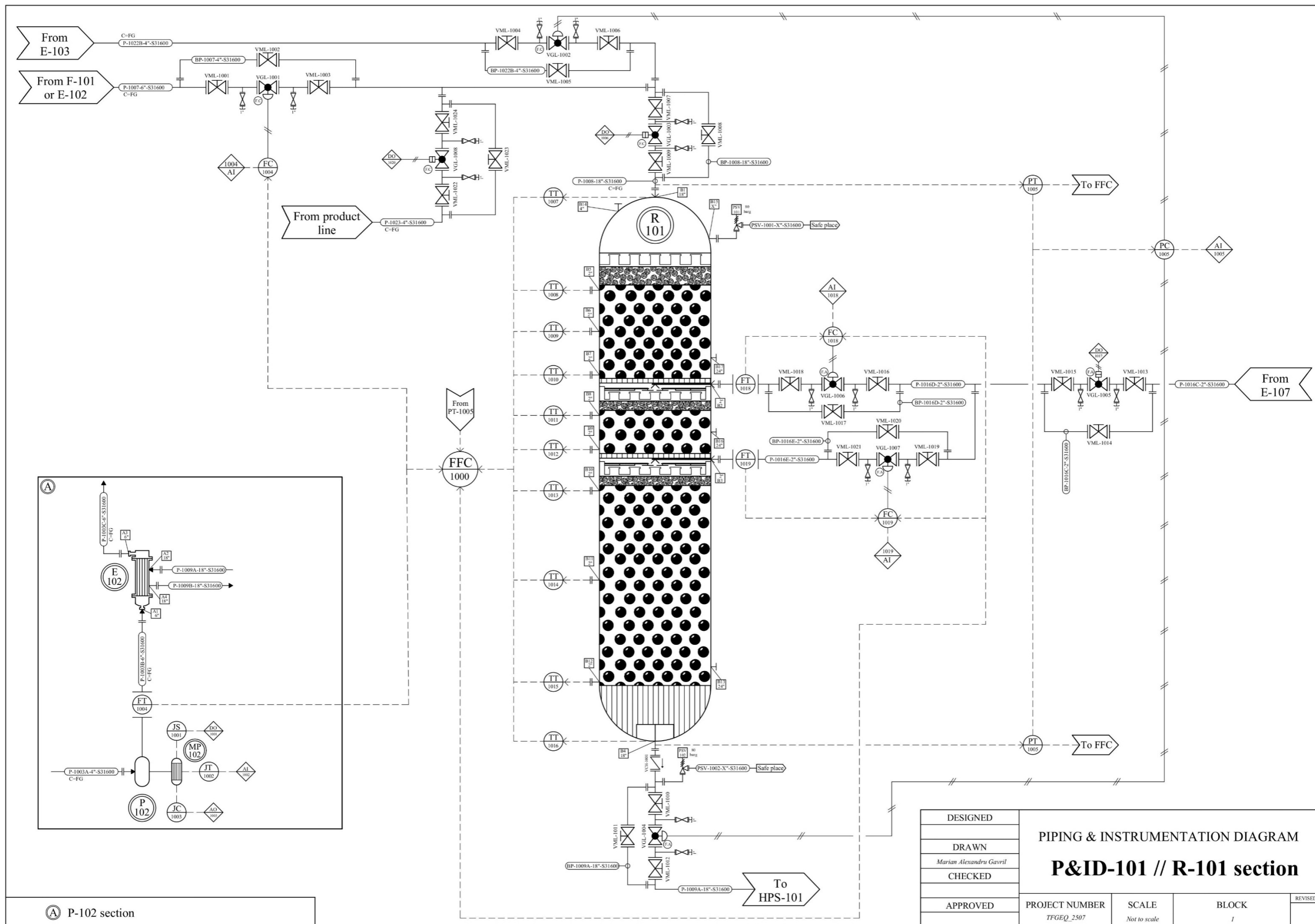


Figura 12.2. Diagrama de canonades i instrumentació (P&ID) del reactor d'hidrotractament.

BIBLIOGRAFIA

- [1] American Society of Mechanical Engineers. (2022). *ASME B31.3-2022: Process piping*. ASME.
- [2] Ancheyta, J. (2011). *Modeling and Simulation Catalytic Reactor for Petroleum Refining*. Canada: John Wiley & Sons. <https://doi.org/10.1002/9780470933565>
- [3] Barbera Elena, Naurzaliyev Rustem, Asiedu Alexander, Bertucco Alberto, P. Resurreccion Eleazer, Sandeep Kumar. *Techno-economic analysis and life-cycle assessment of jet fuels production from waste cooking oil via in situ catalytic transfer hydrogenation*. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0960148120309915?via%3Dihub>
- [4] Catalysts | Topsoe. (s. f.). <https://www.topsoe.com/our-resources/knowledge/our-products/catalysts>
- [5] Chen, S., Zhou, G., & Miao, C. (2018). *Green and renewable bio-diesel produce from oil hydrodeoxygenation: Strategies for catalyst development and mechanism*. *Renewable And Sustainable Energy Reviews*, 101, 568-589. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2018.11.027>
- [6] Cómo reciclar el aceite usado: Pasos a seguir. (2024, 30 septiembre). REPSOL. <https://www.repsol.com/es/energia-futuro/futuro-planeta/reciclar-aceite-usado/index.cshtml>
- [7] Cortés Conde, Félix Fabián,. *Modelamiento y simulación de un reactor de hidrotreatmento para la producción de biodiésel no-éster*. Universit Nacional de Colombia 2021.
- [8] Diario oficial de la UE, Directiva (ue) 2018/2001 del parlamento europeo y del consejo de 11 de diciembre de 2018, relativa al fomento del uso de energía procedente de fuentes renovables.
- [9] Guo Z. (2018). *Chemical composition and nutritional function of olive*.
- [10] Hastert, R. C. (1979). *Hydrogenation of fatty acids*. *Journal Of The American Oil Chemists Society*, 56(11Part1). <https://doi.org/10.1007/bf02667431>
- [11] IDAE, Instituto para la Diversificación y Ahorro de la Energía. *Guía técnica: diseño y cálculo del aislamiento térmico de conducciones, aparatos y equipos*. <https://www.idae.es/publicaciones/guia-tecnica-diseno-y-calculo-del-aislamiento-termico-de-conducciones-aparatos-y>
- [12] K.Kohlia, R.Prajapatia, S.K.Maitya, M.Saub, M.O.Garga. *Deactivation of hydrotreating catalyst by metals in resin and asphaltene parts of heavy oil and residues*. [Deactivation of hydrotreating catalyst by metals in resin and asphaltene parts of heavy oil and residues - ScienceDirect](https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0960148120309915?via%3Dihub).
- [13] Larkins, R. P., White, R. R., & Jeffrey, D. W. (1961). *Two-phase concurrent flow in packed beds*. *AIChE Journal*, 7(2), 231-239. <https://doi.org/10.1002/aic.690070213>
- [14] Megyesy, E. F. (2001). *Pressure Vessel Handbook (7a ed.)*. PennWell Books.
- [15] Patterson, H. (1994). *Hydrogenation of Fats and Oils: Theory and Practice*. <http://ci.nii.ac.jp/ncid/BB16253039>
- [16] Reddy Yenumala, Sunil K., Debaprasad Shee (2016). *Reaction mechanism and kinetic modeling for the hydrodeoxygenation of triglycerides over alumina supported nickel catalyst*.

[17] SANDACH - Subproductos Animales No Destinados a Consumo Humano. (s. f.). <https://servicio.mapa.gob.es/sandach/Publico/default.aspx>

[18] Thepetrosolutions. *Weighted Average Bed Temperature Meaning, Significance and Measurement*. [Weighted Average Bed Temperature Meaning, Significance and Measurement - www.thepetrosolutions.com](http://www.thepetrosolutions.com)

[19] Turton Richard, Shaeiwitz Joseph A ,Bhattacharyya Bebangsu, Whiting Wallace B. *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes (Fifth Edition)*.

[20] Viertorinne, Jukka. *Development of a model predictive controller of hydrotreating reactor co-feeding biobased feed*. Lappeenranta–Lahti University of Technology LUT.

ANNEXOS

A. MODELITZACIÓ DEL REACTOR D'HIDROTRACTAMENT

Al llarg d'aquest capítol es desglossen els diferents passos seguits per a simular i modelitzar el reactor d'hidrotractament d'olis vegetals per a la producció de biocombustibles. Aquesta modelització s'ha realitzat mitjançant el software MATLAB® i té l'objectiu d'implementar un model donat^[16] del món científic cap al món de l'enginyeria.

La modelització del reactor comprèn la validació del model conegut amb un reactor *batch*, per observar el comportament de les cinètiques, posteriorment, la transformació al model desitjat (PBR) amb els ajusts necessaris, la implementació del balanç d'energia i l'ús d'estratègies de control de la temperatura a l'interior del reactor.

L'esquema de reaccions que succeeix a l'interior del reactor d'hidrotractament és el següent:

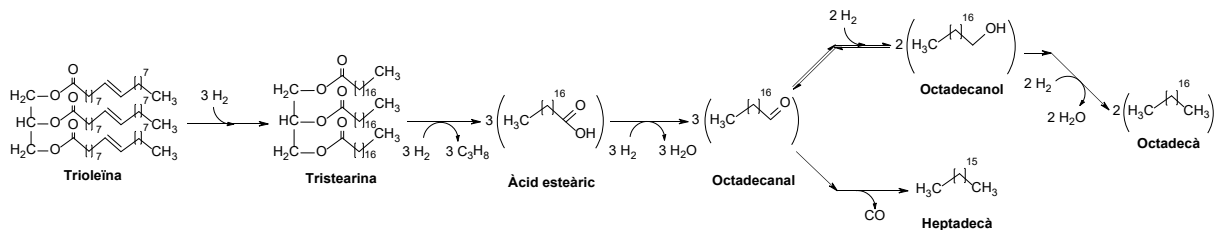


Figura A.1. Esquema de reaccions emprat per la modelització del reactor. S'assumeix una selectivitat 2:1 per a la ruta de l'aigua respecte la ruta del CO.

En comparació amb l'esquema de reaccions present a l'article^[16], s'han plantejat un parell de modificacions:

- El primer pas de l'esquema és la hidrogenació de les oleïnes que conté el triglicèrid
- Posteriorment, la ruptura d'aquest triglicèrid per mitjà d'hidrogen, obté les 3 cadenes de l'àcid gras i propà com a subproducte

La nomenclatura emprada al llarg del capítol per les diferents espècies presents en l'esquema de reaccions és la següent:

- **OLE:** oleïnes (triglicèrid amb oleïnes) – Trioleïna
- **TG:** triglicèrid (triglicèrid sense oleïnes) – Triestearina
- **C₃H₈:** propà
- **A / SA:** àcid gras – Àcid esteàric
- **B:** aldehyd gras – Octadecanal
- **C:** alcà amb n-1 carbonis – Heptadecà
- **D:** alcohol gras – Octadecanol
- **E:** alcà amb n carbonis – Octadecà
- **H₂:** hidrogen
- **H₂O:** aigua
- **CO:** monòxid de carboni

A.1 Validació del model conegut

Per poder modelitzar el reactor, primerament s'ha comprovat el correcte funcionament del model emprat com a base, utilitzant un model *batch* amb les cinètiques obtingudes experimentalment al mateix. Cal mencionar que, per aquesta validació, s'ha utilitzat l'esquema de reaccions del model^[16] (no l'esquema de la Figura A.1).

Les condicions d'operació s'esmenten a la Taula A.1.

Taula A.1. Condicions d'operació per la simulació de la validació del model.

Temperatura (K)	Pressió (bar)	CA ₀ (M)	CB ₀ (M)	CC ₀ (M)	CD ₀ (M)	CE ₀ (M)
613	30	0.0625	0	0	0.015	0

Les constants de velocitat emprades es mostren a la Taula A.2.

Taula A.2. Paràmetres cinètics emprats per la simulació de la validació del model.

k1 (s ⁻¹ *Pa ⁻¹)	k2 (s ⁻¹)	k3 (s ⁻¹ *Pa ⁻¹)	k4 (s ⁻¹)	k equilibri
37.3*10 ⁻¹²	29.17	10 ⁻⁶	9.17*10 ⁻⁵	905.6

El resultat obtingut a la simulació es mostra a Figura A.2.

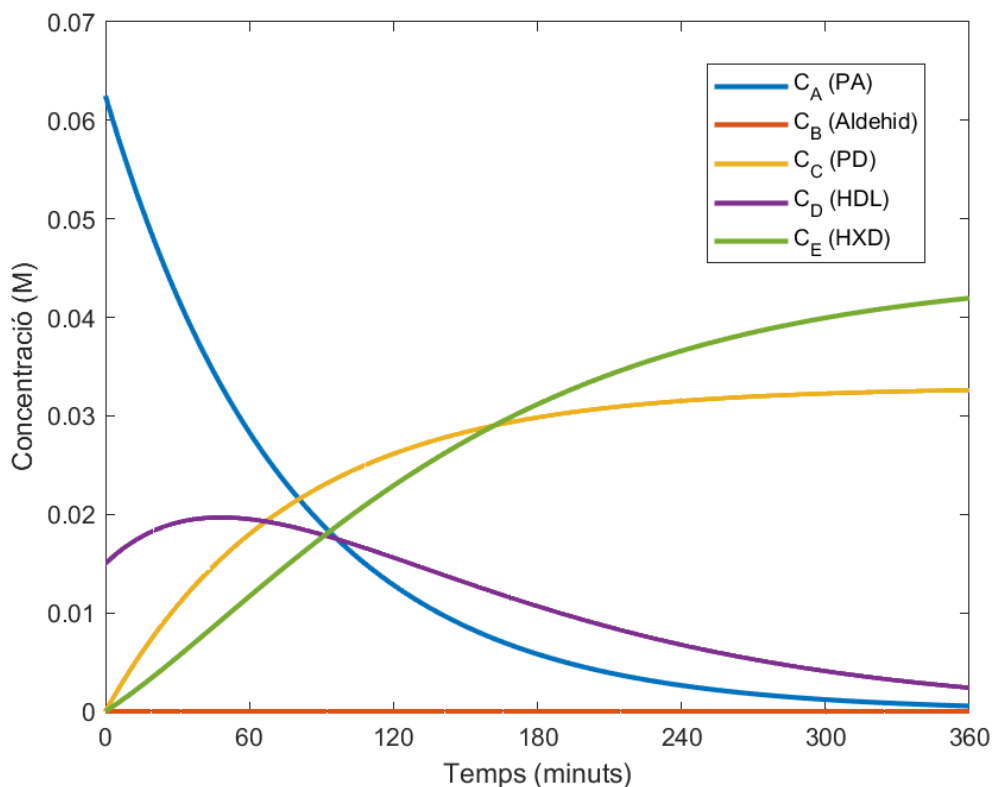


Figura A.2. Concentració molar dels compostos al llarg del temps.

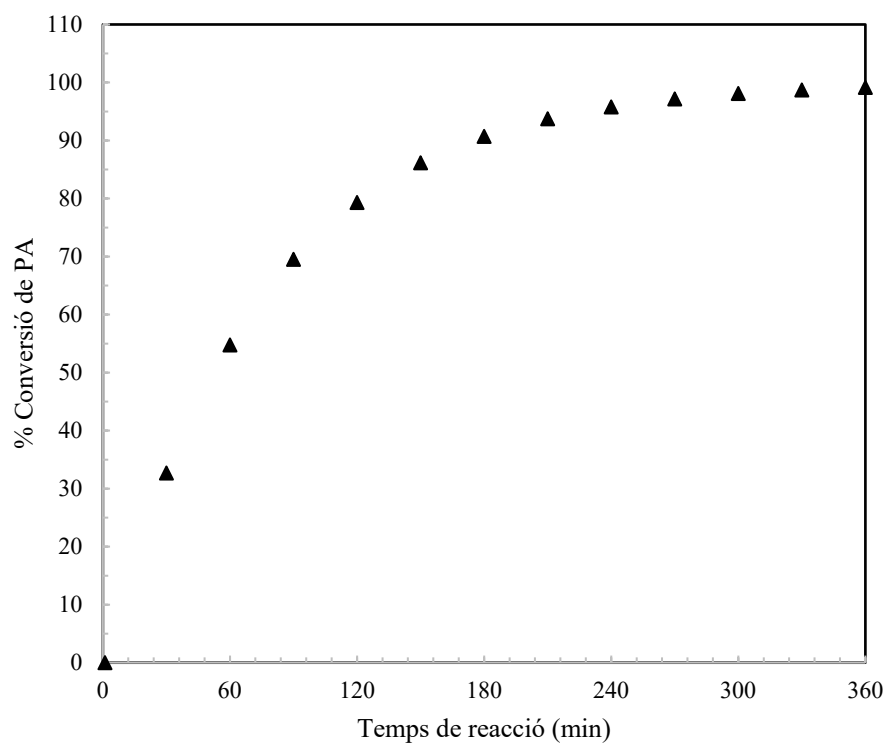


Figura A.3. Conversió assolida respecte l'àcid gras en la simulació *batch*.

En comparació amb els resultats obtinguts pels autors de l'article^[16], s'observa que el model *batch* implementat amb MATLAB® es comporta d'una manera similar a aquests resultats. Observant la línia de color blau (àcid gras) de la Figura A.2 i la conversió assolida respecte aquest a la Figura A.3, es pot comparar la conversió assolida amb la bibliografia. La conversió de triglicèrids assoleix el 100%, d'igual forma que a l'article, encara que hi ha una lleugera diferència en la velocitat que aquesta s'assoleix. S'ha considerat que el model funciona adequadament i s'ha procedit amb la modelització del reactor.

A.2 Disseny del reactor amb flux continu

A continuació, s'ha modelitzat l'esquema fent ús d'equacions de disseny d'un reactor de flux pistó empaquet (PBR). Aquesta modelització és isotèrmica i la massa límit de catalitzador són 100 tones. La producció anual fixada és de 200,000 tones d'heptadecà (C) i octadecà (E). El balanç de matèria del reactor segueix l'expressió A.1.

$$\frac{dF_i}{dW} = v_i \cdot r_i \tag{E-A.1}$$

En aquest pas de la modelització, s'implementen totes les espècies presents en l'esquema de reacció (no només A, B, C, D i E) i es fixa la temperatura i la pressió d'operació a uns valors adequats. El mètode d'integració numèrica escollit és Runge-Kutta de quart ordre (RK4).

A la Taula A.3 es mostren les condicions d'operació inicials i la Taula A.4 mostra les cinètiques emprades per la simulació del reactor PBR, on "A" és el factor pre-exponencial i "Ea" és l'energia d'activació amb unitats de J/mol.

Taula A.3. Condicions d'operació inicials per la simulació del model PBR.

Temperatura (K)	Pressió (bar)	Cabal inicial d'olefines (mol/s)	Cabal inicial d'hidrogen (mol/s)
633	70	9.38	200

Taula A.4. Constants cinètiques emprades per la simulació del model PBR.

Hidrogenació d'olefines	Hidrogenació triglicèrids	Reacció 1	Reacció 2	Reacció 3	Reacció 4
Factor pre-exponencial (A)					
10 ⁻⁵	5*10 ⁻⁵	1.92*10 ⁻⁴	1.67*10 ⁹	1.61*10 ²	3.62*10 ⁸
Energia d'activació (Ea) J/mol					
30,000	50,000	79,900	90,700	84,800	152,700

Els resultats obtinguts de la simulació es mostren a la Figura A.4 i Figura A.5, on s'observen els cabals molars de tots els compostos al llarg del reactor PBR.

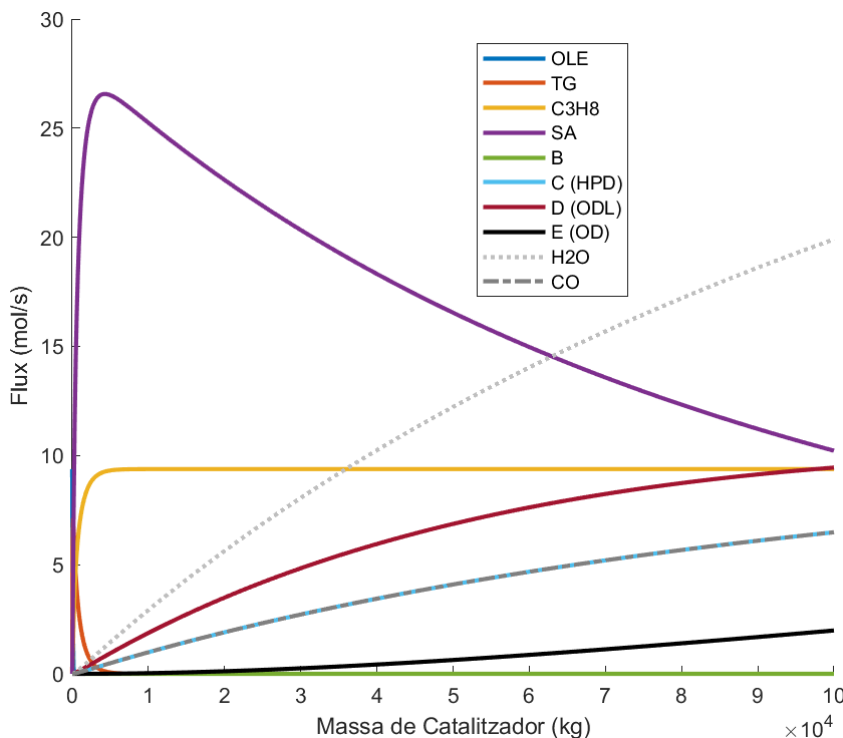


Figura A.4. Cabals molars al llarg del reactor PBR (excepte H₂).

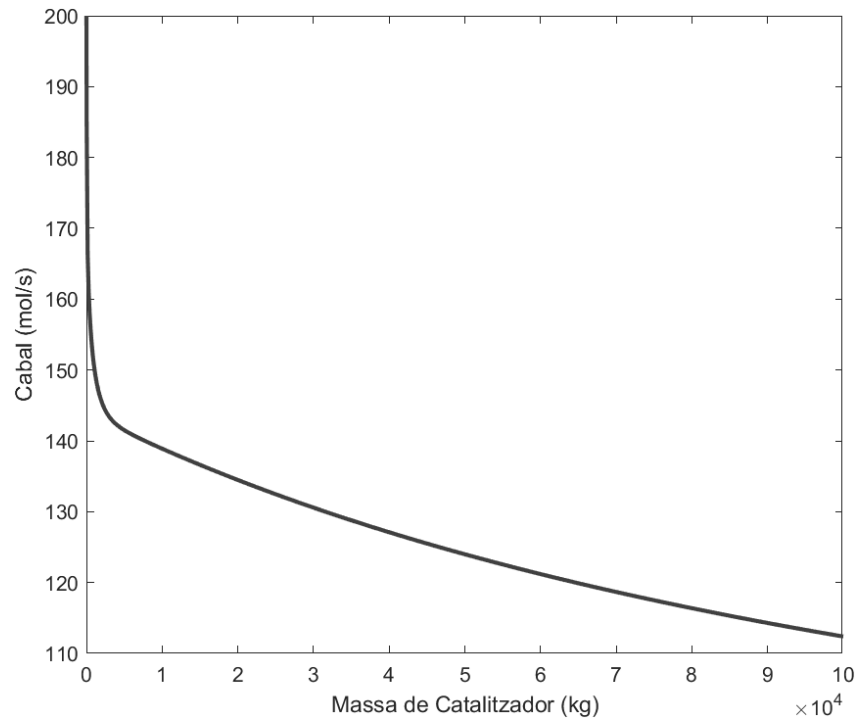


Figura A.5. Cabal molar d'hidrogen al llarg del reactor PBR.

Observant la Figura A.4, es pot concloure ràpidament que la conversió de l'àcid esteàric és molt baixa, tot i haver fixat un límit considerablement elevat de 100 tones de catalitzador. Aquest resultat pot deure en part a què el temps de reacció necessari obtingut pel model *batch* és ja més elevat que l'experimental reportat. Per altra banda, canviar el sistema catalític a un esquema de procés de llit fix pot resultar en les diferències en reactivitat que s'observen en les corbes de conversió de la Figura A.4. La resposta a aquesta hipòtesi és senzilla: calcular el temps de residència a l'interior del PBR i comparar el resultat amb el temps de reacció al reactor *batch*.

$$\tau = \frac{V_{\text{útil}}}{Q_v} = \frac{90.74 \text{ m}^3}{35.60 \text{ m}^3/\text{h}} = 2.55 \text{ hores} = \mathbf{153 \text{ minuts}} \quad (\text{E-A.2})$$

El temps de reacció necessari per assolir gairebé el 100% de conversió al model *batch* anterior és d'uns 360 minuts, mentre que el temps de residència del model PBR és de 153 minuts. A partir d'aquesta comparació, es pot concloure que el catalitzador necessita ser modificat si es vol complir la producció anual de 200 kTA. És per això que les constants de velocitat de les reaccions (excepte les dues primeres) es multipliquen per 10. Aquest ajust té com a objectiu traslladar el sistema catalític de baix desenvolupament tecnològic de l'article, al camp de l'enginyeria d'aquest treball, modificant les capacitats del catalitzador i permetent portar a terme la reacció en un entorn realista. Per aquest motiu, el catalitzador considerat a la simulació hauria de ser millorat i optimitzat per tal de fer-lo servir en un hidrotractament a escala industrial. Amb aquest ajust implementat, els cabals molars actualitzats es mostren a la Figura A.6 i a la Figura A.7.

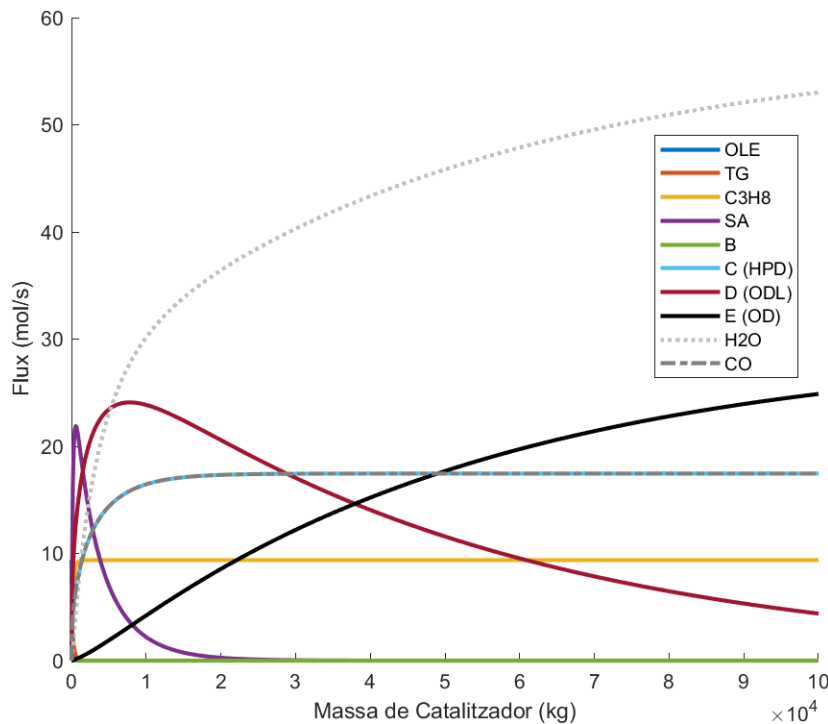


Figura A.6. Cabals molars actualitzats al llarg del reactor PBR (excepte H₂).

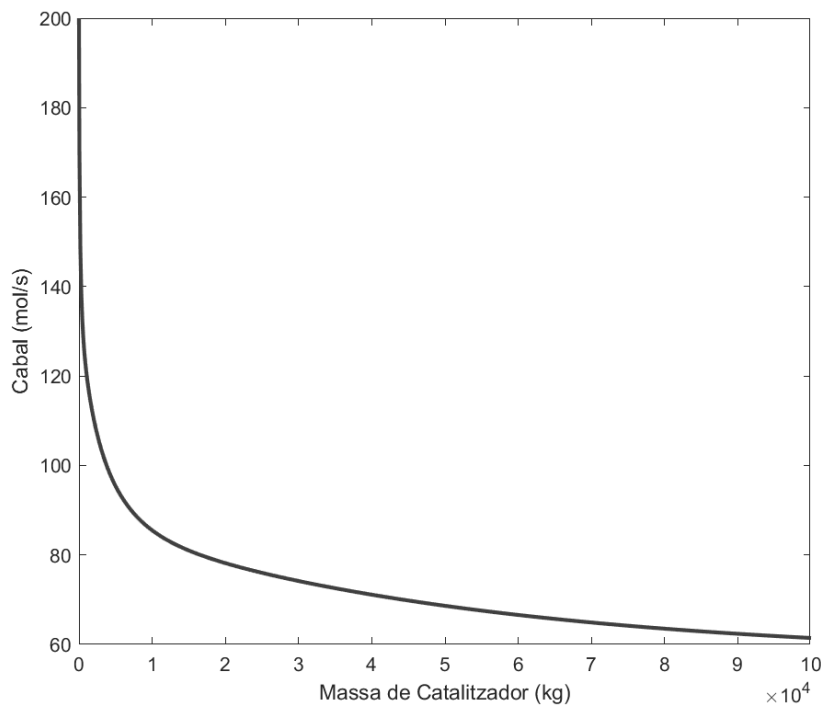


Figura A.7. Cabal molar d'hidrogen actualitzat al llarg del reactor PBR.

Amb els valors de les constants multiplicats per 10, s'observa que la conversió assolida és total, obtenint la producció fixada per l'heptadecà (C) i octadecà (E). En comparació amb els resultats obtinguts anteriorment pel model *batch*, és visible la similitud en els perfils dels compostos i es pot concloure que és possible la simulació del reactor per un model de flux pistó empaquet amb el límit de 100 tones de catalitzador, gràcies a l'ajust de les constants cinètiques. Tanmateix, s'observa que les dues primeres reaccions (hidrogenació d'olefines i, seguidament, triglicèrids) ocorren en un instant molt curt de temps, a diferència de la resta de reaccions. Aquest aspecte és d'alta rellevància per a la secció següent, on s'implementa el balanç d'energia i on es veu l'exotermicitat d'aquestes reaccions.

A.3 Implementació del balanç d'energia al reactor

S'ha procedit a la simulació del reactor PBR no-isotèrmic, on és necessari implementar el balanç d'energia per simular una situació més realista, que no pas la d'un model isotèrmic. Es tracta d'un reactor adiabàtic, on la calor produïda a l'interior del reactor no interacciona amb l'exterior. Per fer això, s'han cercat les capacitats calorífiques dels compostos presents en l'esquema de reaccions, i la temperatura ara és una variable, no una constant. Seguidament, és important determinar les entalpies de reacció de cadascuna de les reaccions del model. Aquest càlcul es porta a terme seguint el mètode de les energies d'enllaç, segons l'expressió A.3.

$$\Delta H_r = \sum E_{\text{enllaços trencats}} - \sum E_{\text{enllaços formats}} \quad (\text{E-A.3})$$

Taula A.5. Valors de les entalpies de la reacció.

Reacció	Entalpia (kJ/mol)
Reacció 1	-366
Reacció 2	-237
Reacció 3	-237
Reacció 4	-59.0
Reacció 5	-118
Reacció 6	-158

A partir de les dades de la Taula A.6, es pot concloure que l'esquema de reaccions és altament exotèrmic. Un cop conegudes les entalpies de reacció i les capacitats calorífiques dels compostos, s'ha implementat el balanç d'energia a la simulació. Amb l'expressió A.3, s'ha determinat l'increment de temperatura resultant de les reaccions al llarg del reactor PBR.

$$\Delta T_{\text{reactor}} [K] = - \frac{\sum H r_i \times r_i}{\sum F_j \times C_{p_j}} = \frac{(J/mol \times mol/s)}{\left(\frac{mol}{s} \times \frac{J}{mol \cdot K}\right)} \quad (\text{E-A.4})$$

Aquesta equació es defineix com una nova equació diferencial a la integració numèrica, introduïda al software segons l'expressió A.4. D'aquesta manera, es calcula l'increment de temperatura a causa de les reaccions en una secció diferencial del llit, i al llarg de tot el reactor PBR, sent sempre un increment positiu perquè totes les reaccions són exotèrmiques.

$$\frac{dT}{dW} = - \frac{\sum H r_i \cdot r_i}{\sum F_j \cdot C_{p_j}} \quad (\text{E-A.5})$$

On:

- $\frac{dT}{dW}$ és la variació de temperatura respecte la massa de catalitzador.
- $\Delta H r_i$ és la entalpia de reacció (J/mol) de la reacció i.
- r_i és la velocitat de reacció (mol/s) per a la reacció i.
- F_j és el cabal molar de l'espècie j (mol/s).
- $C_{p,j}$ és la capacitat calorífica de l'espècie j (J/mol·K).

A continuació, a la Taula A.6 es mostren les condicions d'operació inicials per aquesta simulació i les constants cinètiques són idèntiques a les mostrades a l'apartat A.2.

Taula A.6. Condicions d'operació inicials pel model PBR amb el balanç d'energia.

Temperatura d'entrada (K)	Pressió (bar)	Cabal d'olefines inicial (mol/s)	Cabal d'hidrogen inicial (mol/s)
373.15	70	9.38	120

Seguidament, es mostren els resultats obtinguts per la simulació del reactor PBR amb la implementació del balanç d'energia. Es mostren els cabals de tots els compostos (excepte l'hidrogen), el cabal d'hidrogen i la temperatura al llarg del reactor a la Figura A.8, Figura A.9 i Figura A.10, respectivament.

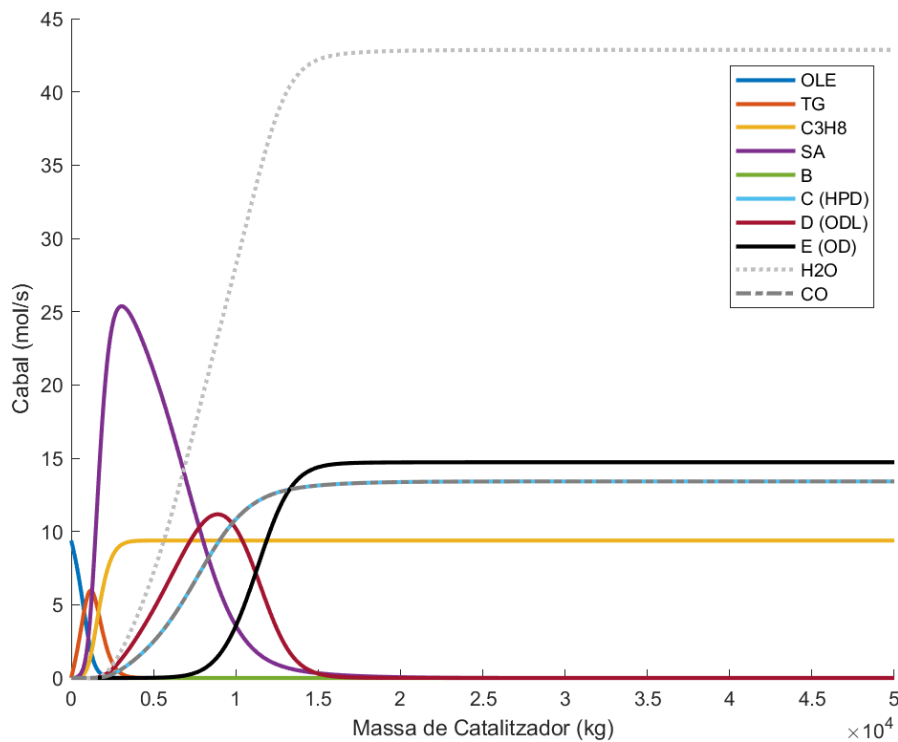


Figura A.8. Cabals molars dels compostos (excepte H₂) al llarg del reactor PBR amb la implementació del balanç d'energia.

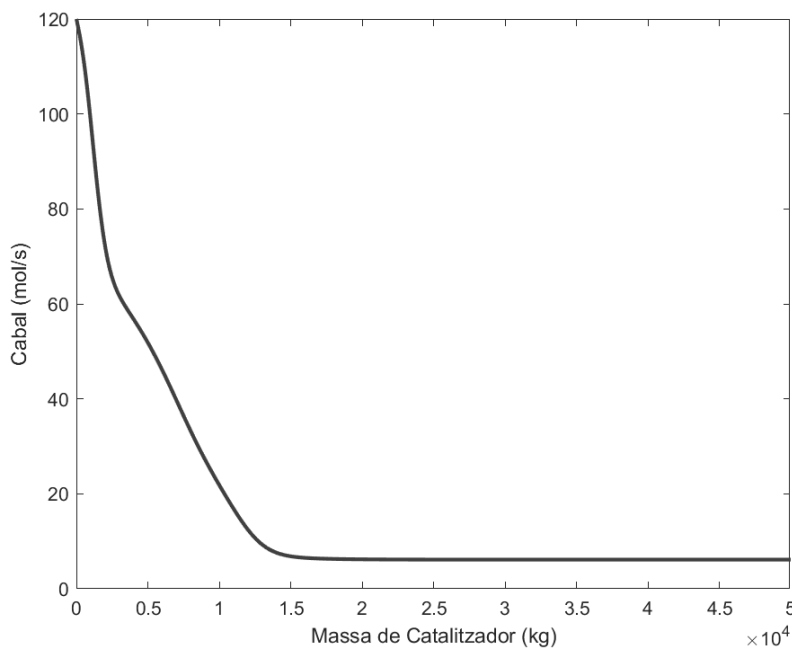


Figura A.9. Cabal molar d'hidrogen al llarg del reactor PBR amb la implementació del balanç d'energia.

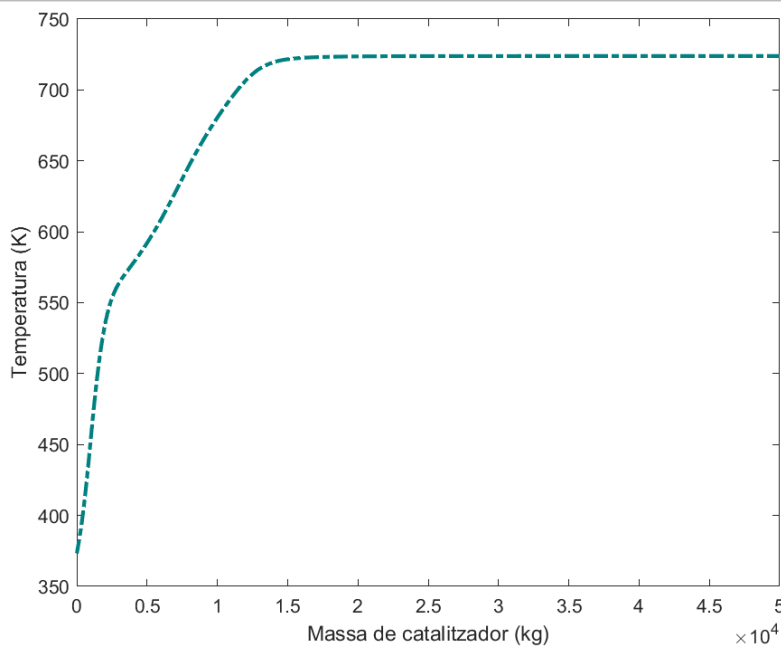


Figura A.10. Temperatura al llarg del reactor PBR amb la implementació del balanç d'energia.

Tal i com s'ha previst durant la simulació de l'apartat A.2 (model isotèrmic), la temperatura del reactor augmenta de forma sobtada a la secció inicial, arribant a assolir un valor de 724K (450°C) a la sortida del mateix. Un aspecte molt important a tenir en compte és la temperatura a la que succeeix la degradació dels lípids, la qual es troba al voltant dels 400°C normalment.

Als resultats s'observa que la massa de catalitzador total no és de 100 tones, ja que degut a les altes temperatures de procés, la conversió total s'assoleix abans, tot i no ser temperatures de procés vàlides. La temperatura a l'interior del reactor arriba a la temperatura de degradació dels lípids molt ràpidament i és evident que es necessiten mesures per controlar-la. Malgrat això, es compleix l'objectiu d'aquest pas, el qual és implementar correctament el balanç d'energia a la simulació del reactor PBR.

A.4 Estratègies de control de temperatura a l'interior del reactor

La modelització del reactor d'hidrotractament ha conclòs amb la implementació d'estratègies de control per mantenir la temperatura del reactor per sota de la temperatura de degradació dels lípids, esmentada anteriorment, la qual es troba al voltant dels 400°C generalment. És per això que es fixa la temperatura màxima de la simulació als 380°C, evitant conservadorament l'escenari de degradació dels reactius.

Per abaixar la temperatura a l'interior del reactor s'han considerat 3 alternatives viables per la simulació i pel procés:

1. Injecció d'hidrogen fred (*quench*) en una o més parts del reactor PBR
2. Injecció del producte fred (*quench*) en una o més parts del reactor PBR
3. Recirculació de producte a l'entrada del reactor PBR per reduir les concentracions i, per tant, les velocitats de reacció

Després d'una prova curta, es descarta la primera alternativa ja que la capacitat calorífica de l'hidrogen és molt petita i es necessita addicionar una quantitat molt alta per abaixar suficientment la temperatura, sent inviable la seva implementació. La segona alternativa ofereix una refrigeració adequada, ja que la capacitat calorífica dels productes (heptadecà i octadecà) són elevades i no requereix un cabal de *quench* alt. La tercera alternativa funciona adequadament, però, després de diverses proves, s'ha observat que no és necessària la recirculació a l'entrada, ja que la segona alternativa pot complir la seva funció per sí mateixa, es simplifica el procés de reacció i evita un possible sobredimensionament del volum del reactor.

Per tant, es decideix que la temperatura del reactor PBR es controla amb injeccions fredes dels productes principals del procés. Per implementar aquesta modificació al model, s'ha de recalculat la nova temperatura resultant d'afegir certa quantitat de *quench* a certa temperatura d'entrada, a les zones del llit que requereixin aquesta refrigeració. Donat un punt concret d'entrada del *quench*, aquest càlcul es porta a terme segons l'expressió A.5, recalculant la nova temperatura del fluid, assumint una estabilització de temperatura quasi instantània.

$$T_{nova} = \frac{(\sum F_j \cdot Cp_j \cdot T_{actual}) + (F_{quench} \cdot Cp_{quench} \cdot T_{quench})}{(\sum F_j \cdot Cp_j) + (F_{quench} \cdot Cp_{quench})} \quad (E-A.6)$$

Seguidament, es decideix en quin moment, quina quantitat i a quina temperatura injectar aquest *quench* per assolir la producció anual sense passar de la temperatura màxima a l'interior del reactor (380°C o 653.15K). A la Taula A.7 es mostren les condicions d'injecció d'aquests *quench*. A l'apartat A.5 es mostra una anàlisi de sensibilitat, en la qual s'observa el comportament de diferents paràmetres, entre ells, les condicions d'injecció de *quench* (s'explica la raó d'aquestes condicions d'injecció de *quench*).

Taula A.7. Condicions d'injecció dels *quench*.

Nº <i>quench</i>	Cabal de <i>quench</i> (mol/s)	Temperatura del <i>quench</i>	Temperatura màxima del reactor (K)	Secció del reactor (ton. cat.)
1	1.34 mol/s C + 2.66 mol/s E	323.15	648.15	27.8
2	0.84 mol/s C + 1.66 mol/s E	323.15	653.15	40.7

La forma en la que s'ha simulat la injecció dels *quench* és la següent:

- Es defineix un vector de temperatures màximes del reactor PBR [648.15 i 653.15K] i un altre vector de cabals de *quench* [4 i 2.5 mol/s]. Els valors fixats del vector de temperatura es defineixen properes al llindar de la degradació dels lípids i en ordre ascendent, perquè la segona injecció de *quench* comporta el risc de desaccelerar massa l'activitat catalítica, evitant assolir el 100% de la conversió. Els valors del vector de cabal de *quench* es fixen a uns valors intermedis als observats com a excessius o insuficients durant l'anàlisi de sensibilitat: una injecció d'1 mol/s és insuficient per reduir la temperatura i una injecció de 10 mol/s ofega excessivament la reacció, resultant en una operació no viable industrialment.
- Quan la temperatura del reactor assoleix el valor de la posició 1 del vector de temperatures, s'injecta el cabal de *quench* igual al valor de la posició 1 de l'altre vector. Per exemple, en aquest cas, quan la temperatura del reactor arriba als 648.15K, s'injecten 4 mol/s de la mescla C + E provinent de l'*stripper* a 323.15K, corrent 16C de procés (la temperatura a la que s'injecta el *quench* és fixa i s'ha estudiat amb detall a l'anàlisi de sensibilitat posterior).
- La injecció del *quench* provoca una baixada de temperatura sense evitar que les reaccions s'aturin i la temperatura a l'interior del reactor pugui remuntar. Seguint el mateix criteri, s'injecta el segon *quench*.

A continuació, es mostren diferents taules amb les condicions inicials de la simulació del reactor PBR amb la implementació d'estratègies de control de temperatura. A la Taula A.8 es mostren les condicions d'operació del reactor i els cabals molars inicials. La condició d'injecció dels diferents *quench* es mostra a la Taula A.7 anterior.

Taula A.8. Condicions d'operació inicials per la simulació del reactor amb injecció de *quench*.

Temperatura d'entrada (K)	Pressió (bar)	Cabal inicial d'olefines (mol/s)	Cabal inicial d'hidrogen (mol/s)
413.15	70	9.38	400

Amb aquestes condicions d'operació, els resultats de la simulació obtinguts es mostren a continuació. Es mostren els cabals dels diferents compostos (excepte H₂), el cabal d'hidrogen i la temperatura al llarg del reactor a la Figura A.11, Figura A.12 i Figura A.13, respectivament.

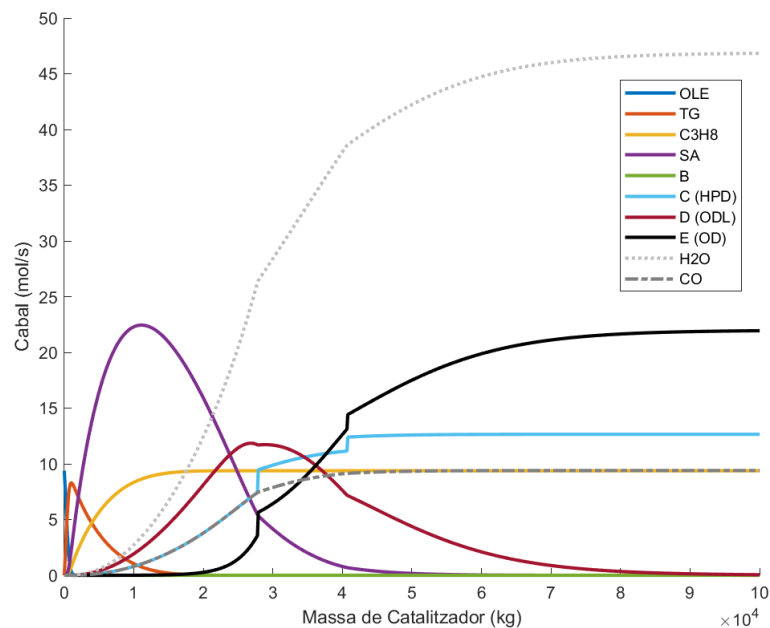


Figura A.11. Cabals dels compostos (excepte H₂) al llarg del reactor PBR per la simulació amb estratègies de control de temperatura.

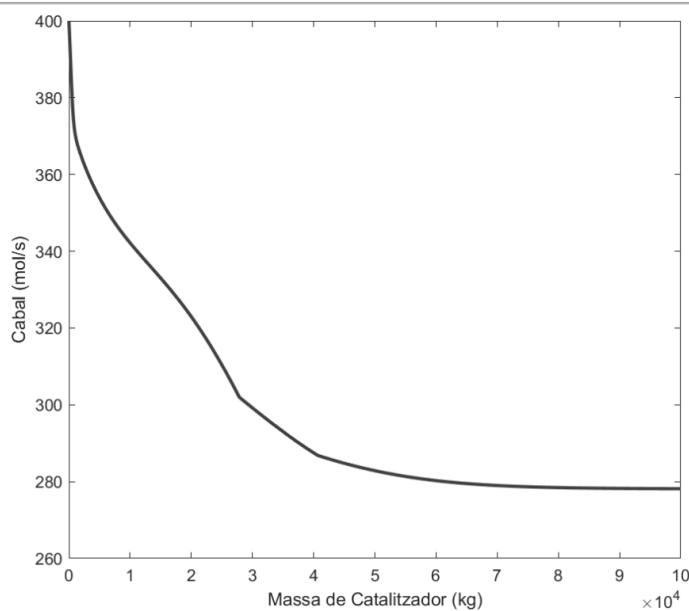


Figura A.12. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor PBR per la simulació amb estratègies de control de temperatura.

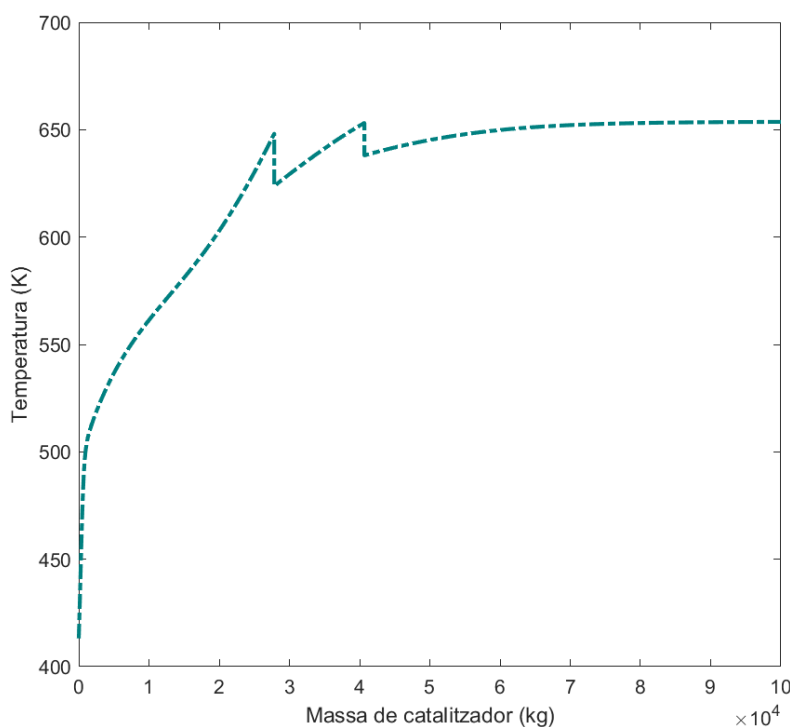


Figura A.13. Temperatura al llarg del reactor PBR per la simulació amb estratègies de control de temperatura.

A partir dels resultats obtinguts, es poden extreure diverses conclusions: no s'assoleix en cap moment la temperatura de degradació dels lípids, es compleix la producció fixada de 200 kTA i el cabal molar necessari per les injeccions de *quench* és viable econòmicament i industrialment. A més a més, no hi ha àcid esteàric ni octadecanol a la sortida del reactor, aspecte molt important de cara a la següent etapa de l'hidrotractament: el reactor d'isomerització. Per tant, s'ha donat per finalitzada la simulació i s'ha portat a terme una anàlisi de sensibilitat per determinar i justificar les condicions d'operació més adequades pel reactor PBR.

A.5 Anàlisi de sensibilitat del reactor d'hidrotractament

Després de finalitzar la simulació i modelització del reactor, s'ha portat a terme una anàlisi de sensibilitat de diferents paràmetres del reactor d'hidrotractament d'olis vegetals. S'ha analitzat l'impacte que té la modificació de diferents paràmetres en la producció i temperatura a la sortida del reactor (la qual és usualment la temperatura màxima). Els paràmetres modificats es llisten a continuació:

- Cabal d'injecció de *quench*
- Temperatura d'injecció de *quench*
- Temperatura d'alimentació al reactor PBR
- Cabal d'hidrogen d'alimentació al reactor PBR

Tanmateix, les variables tabulades són les següents:

- Cabals de tots els compostos a la sortida del reactor PBR
- Temperatura màxima assolida en el reactor PBR

Abans de començar a analitzar l'impacte de les variables mencionades, a la Taula A.9 es mostren els valors base a partir dels quals s'extreuen conclusions. Aquests valors són els considerats òptims pel reactor i són els que es comparen amb tots els resultats de l'anàlisi de sensibilitat.

Taula A.9. Valors base òptims dels paràmetres modificats en l'anàlisi de sensibilitat.

Cabal d'injecció de <i>quench</i> (mol/s)	Temperatura d'injecció de <i>quench</i> (K)	Temperatura d'alimentació al reactor (K)	Cabal d'hidrogen a l'alimentació (mol/s)
6.5	323.15	413.15	400

Taula A.10. Valors base òptims de les variables tabulades en l'anàlisi de sensibilitat.

Variable tabulada	Valor
Cabal de sortida d'olefines (OLE)	0.00 mol/s
Cabal de sortida de triglicèrids (TG)	0.00 mol/s
Cabal de sortida de propà (C ₃ H ₈)	9.38 mol/s
Cabal de sortida d'àcid esteàric (SA)	0.00 mol/s
Cabal de sortida d'octadecanal (B)	0.00 mol/s
Cabal de sortida d'heptadecà (C)	12.65 mol/s
Cabal de sortida d'octadecanol (D)	0.05 mol/s
Cabal de sortida d'octadecà (E)	21.94 mol/s
Cabal de sortida d'hidrogen (H ₂)	278.15 mol/s
Cabal de sortida d'aigua (H ₂ O)	46.83 mol/s
Cabal de sortida de monòxid de carboni (CO)	9.40 mol/s
Temperatura màxima del reactor	653.64 K

A.5.1 Cabal d'injecció de *quench*

S'analitza l'efecte que té el cabal d'injecció de *quench* en la producció i la temperatura màxima del reactor. El cabal molar total de *quench* és 6.5 mol/s, així que s'analitza l'impacte que té utilitzar ± 1 mol/s i ± 2 mol/s. Per tant, es mostren els cabals de sortida i la temperatura màxima del reactor per cabals de *quench* de 4.5, 5.5, 7.5 i 8.5 mol/s a la Taula A.11. A més a més, es mostren els cabals de tots els compostos (excepte H₂), el cabal d'hidrogen i la temperatura al llarg del reactor PBR pels 4 experiments, des de la Figura A.14 fins la Figura A.25.

Taula A.11. Efecte de la variació del cabal de *quench* (considerant la suma dels dos corrents de *quench*) en els cabals de sortida i temperatura.

Cabals finals i temperatura màxima	4.5 mol/s de <i>quench</i>	5.5 mol/s de <i>quench</i>	7.5 mol/s de <i>quench</i>	8.5 mol/s de <i>quench</i>
Olefines	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s
Triglicèrids	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s
Propà	9.38 mol/s	9.38 mol/s	9.38 mol/s	9.38 mol/s
Àcid esteàric	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s
Octadecanal	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s
Heptadecà	11.66 mol/s	12.16 mol/s	13.14 mol/s	13.64 mol/s
Octadecanol	0.00 mol/s	0.01 mol/s	0.18 mol/s	0.41 mol/s
Octadecà	20.98 mol/s	21.48 mol/s	22.32 mol/s	22.59 mol/s
Hidrogen	278.13 mol/s	278.12 mol/s	278.27 mol/s	278.49 mol/s
Aigua	46.87 mol/s	46.87 mol/s	46.71 mol/s	46.48 mol/s
Monòxid de carboni	9.41 mol/s	9.41 mol/s	9.39 mol/s	9.39 mol/s
Temperatura màxima del reactor	665.65 K	659.51 K	653.15 K	653.15 K
Resultat	No apte	No apte	Apte	Apte

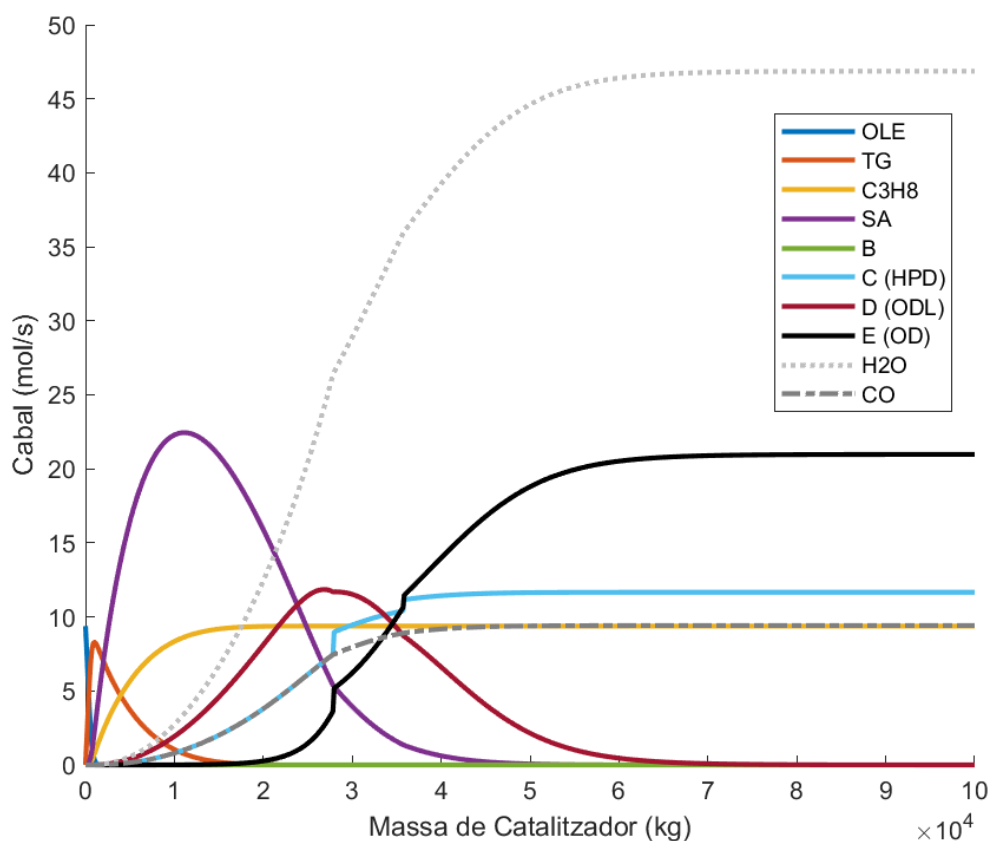


Figura A.14. Cabals de tots els compostos (excepte H₂) al llarg del reactor PBR per la simulació amb 4.5 mol/s de *quench*.

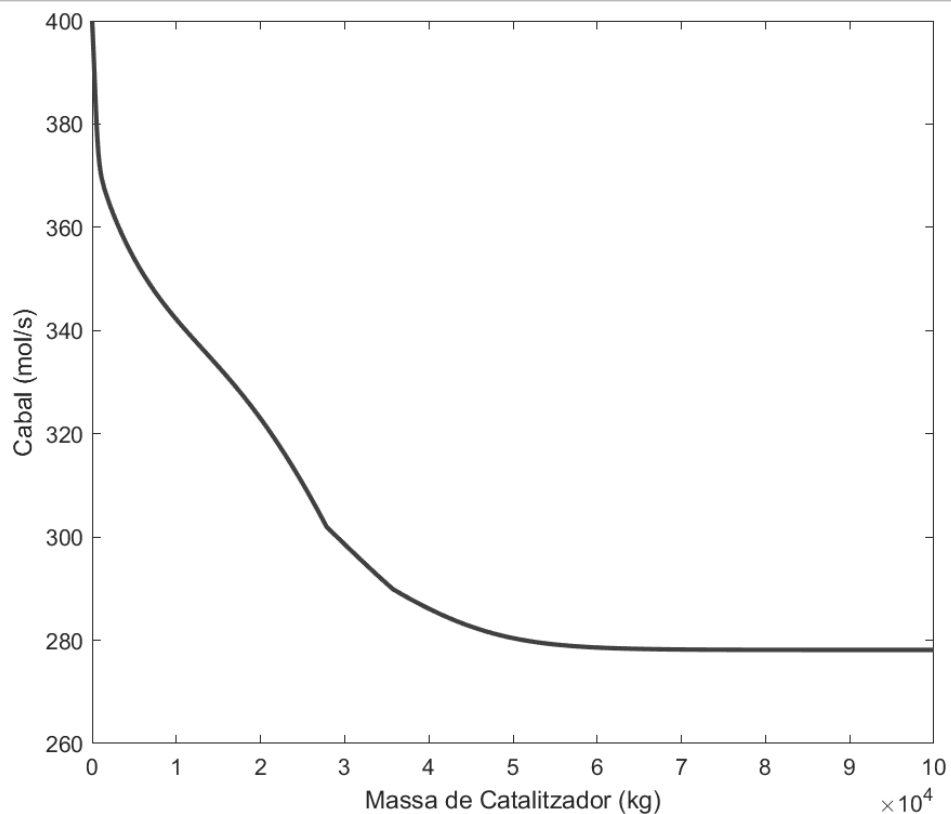


Figura A.15. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor PBR per la simulació amb 4.5 mol/s de *quen*ch.

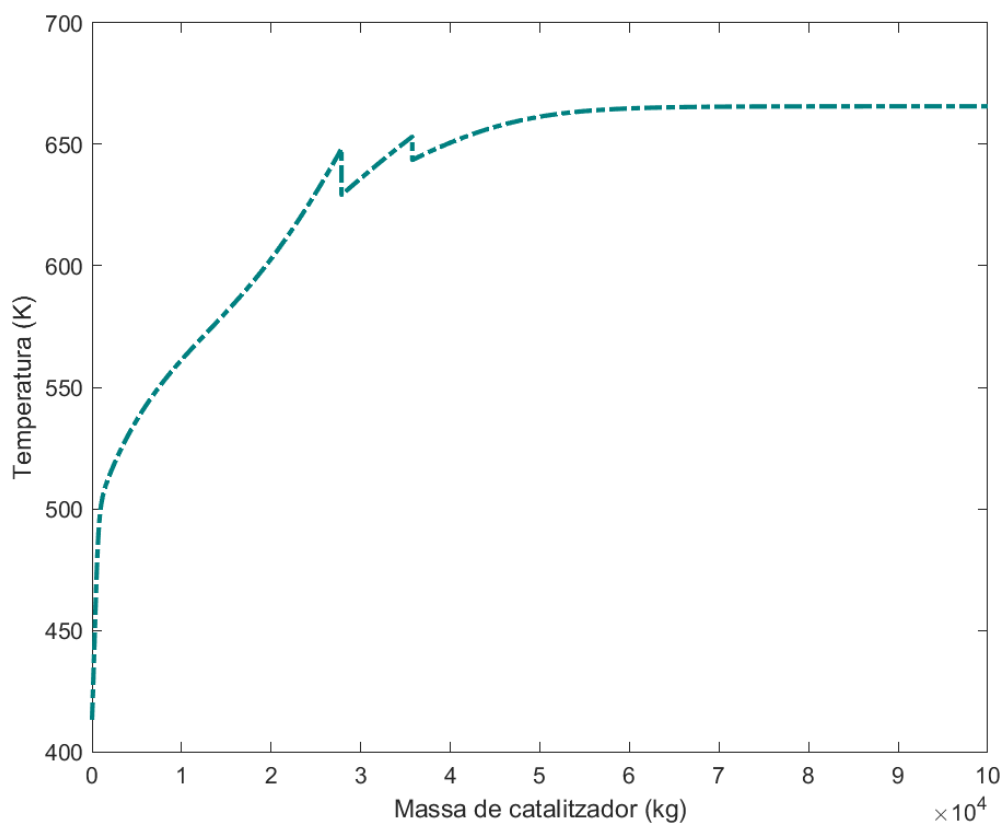


Figura A.16. Temperatura al llarg del reactor PBR per la simulació amb 4.5 mol/s de *quen*ch.

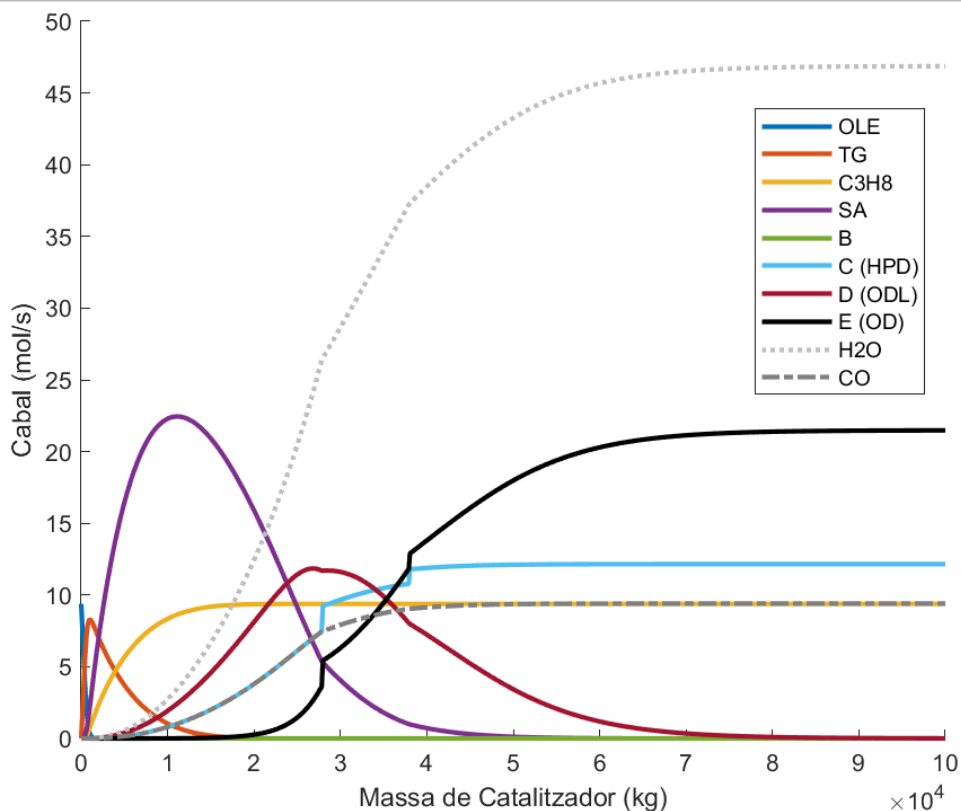


Figura A.17. Cabals de tots els compostos (excepte H₂) al llarg del reactor PBR per la simulació amb 5.5 mol/s de *quench*.

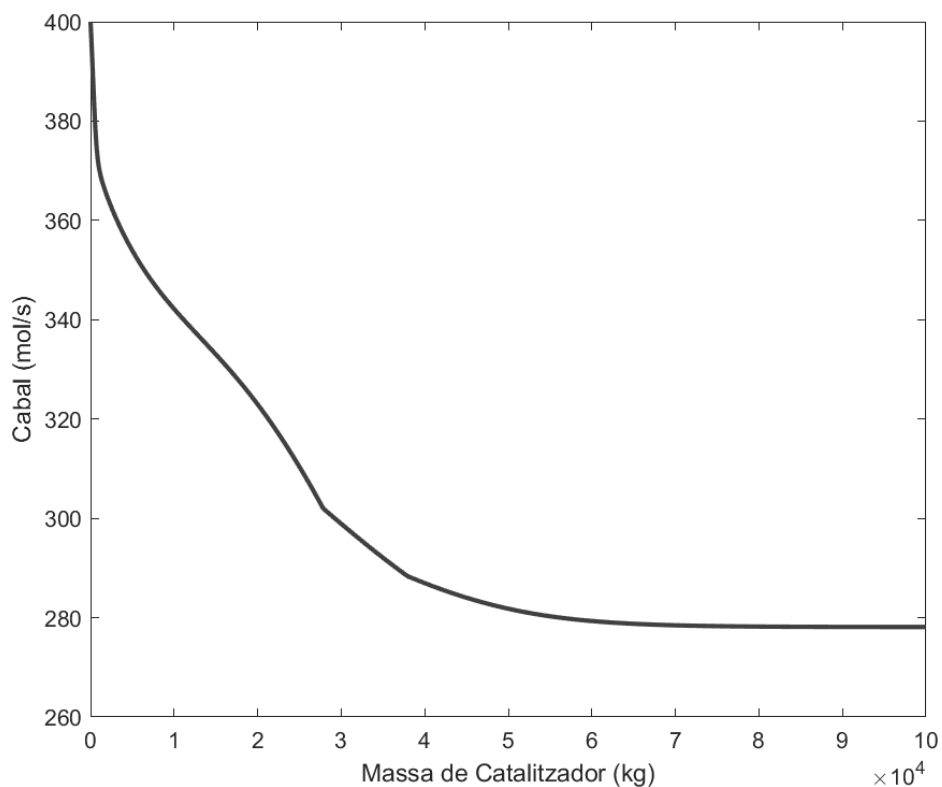


Figura A.18. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor PBR per la simulació amb 5.5 mol/s de *quench*.

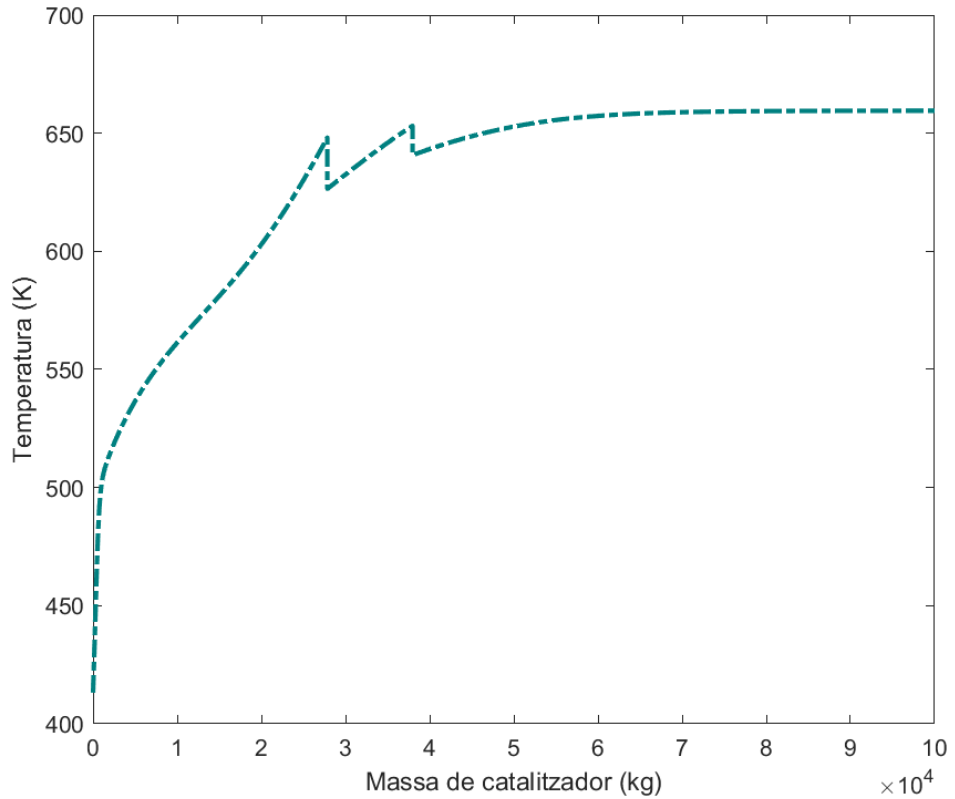


Figura A.19. Temperatura al llarg del reactor PBR per la simulació amb 5.5 mol/s de *quench*.

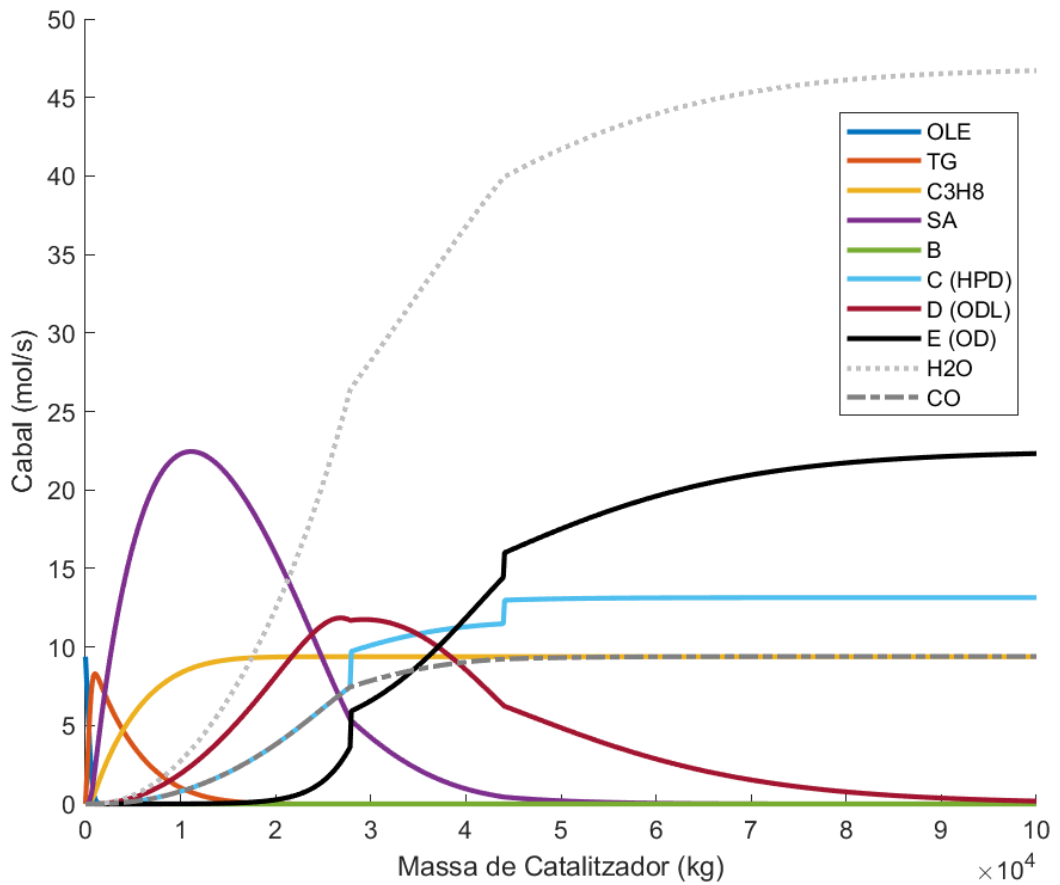


Figura A.20. Cabals de tots els compostos (excepte H₂) al llarg del reactor PBR per la simulació amb 7.5 mol/s de *quench*.

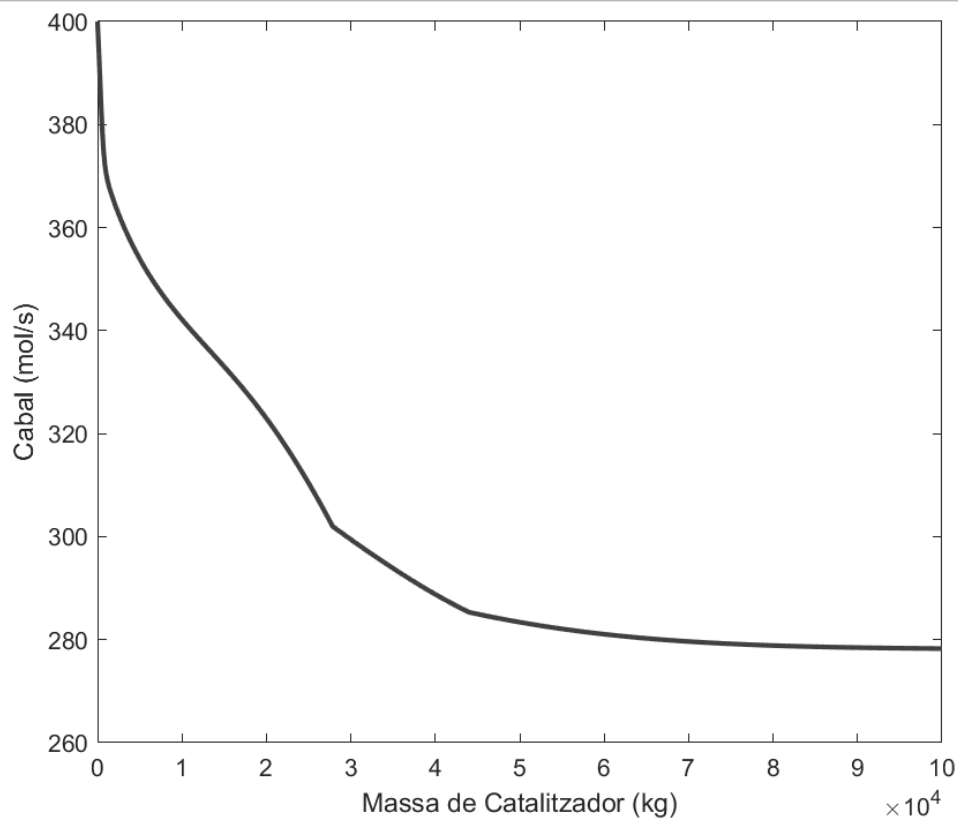


Figura A.21. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor PBR per la simulació amb 7.5 mol/s de *quench*.

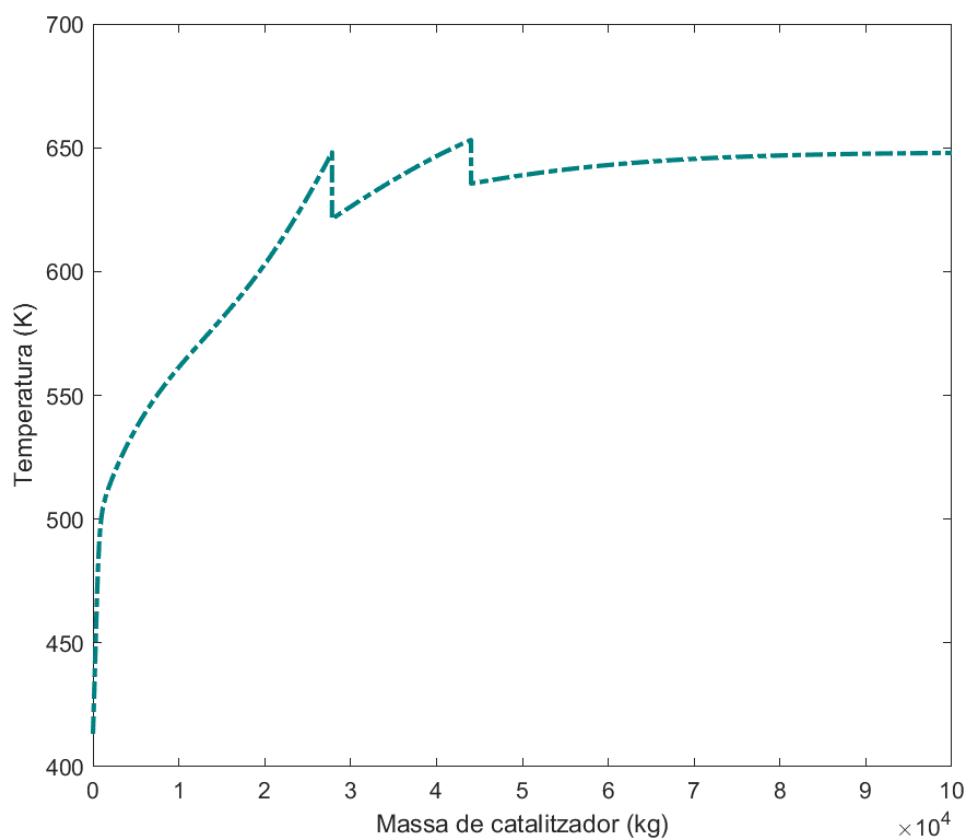


Figura A.22. Temperatura al llarg del reactor PBR per la simulació amb 7.5 mol/s de *quench*.

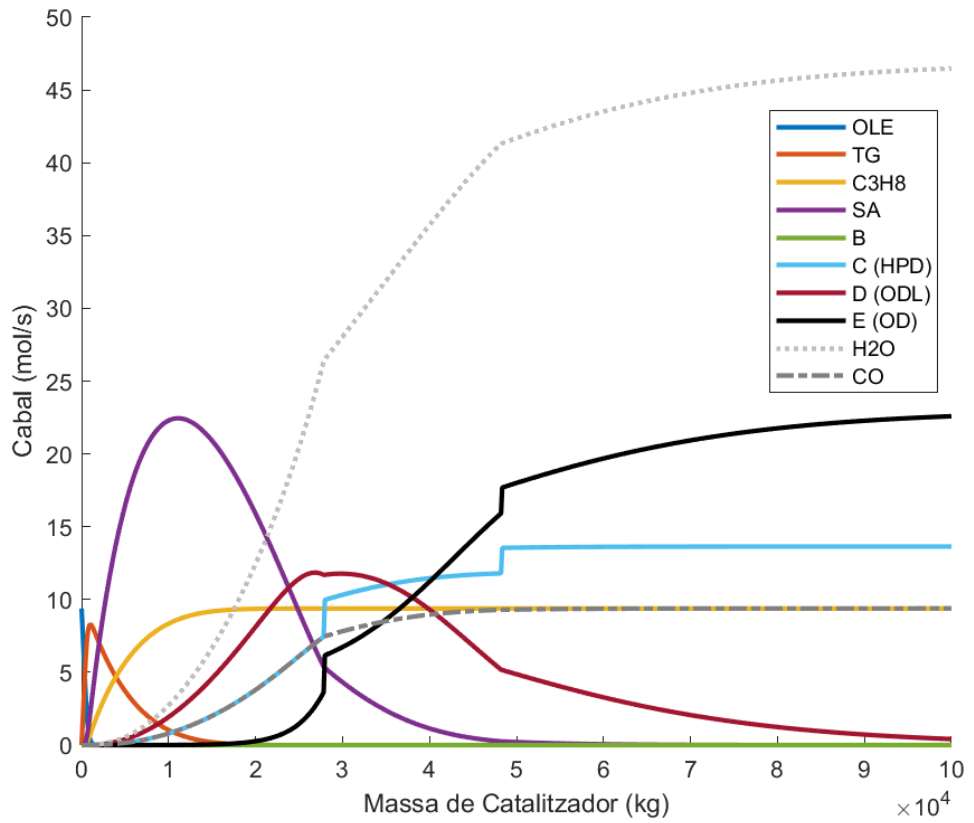


Figura A.23. Cabals de tots els compostos (excepte H₂) al llarg del reactor PBR per la simulació amb 8.5 mol/s de *quench*.

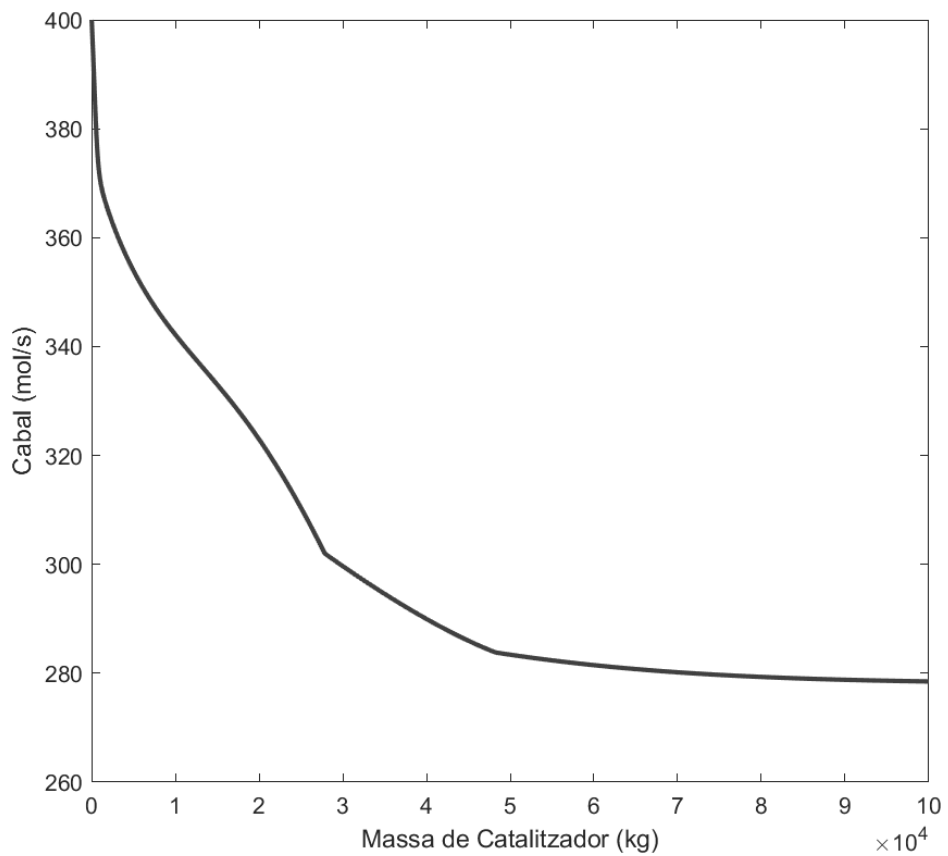


Figura A.24. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor PBR per la simulació amb 8.5 mol/s de *quench*.

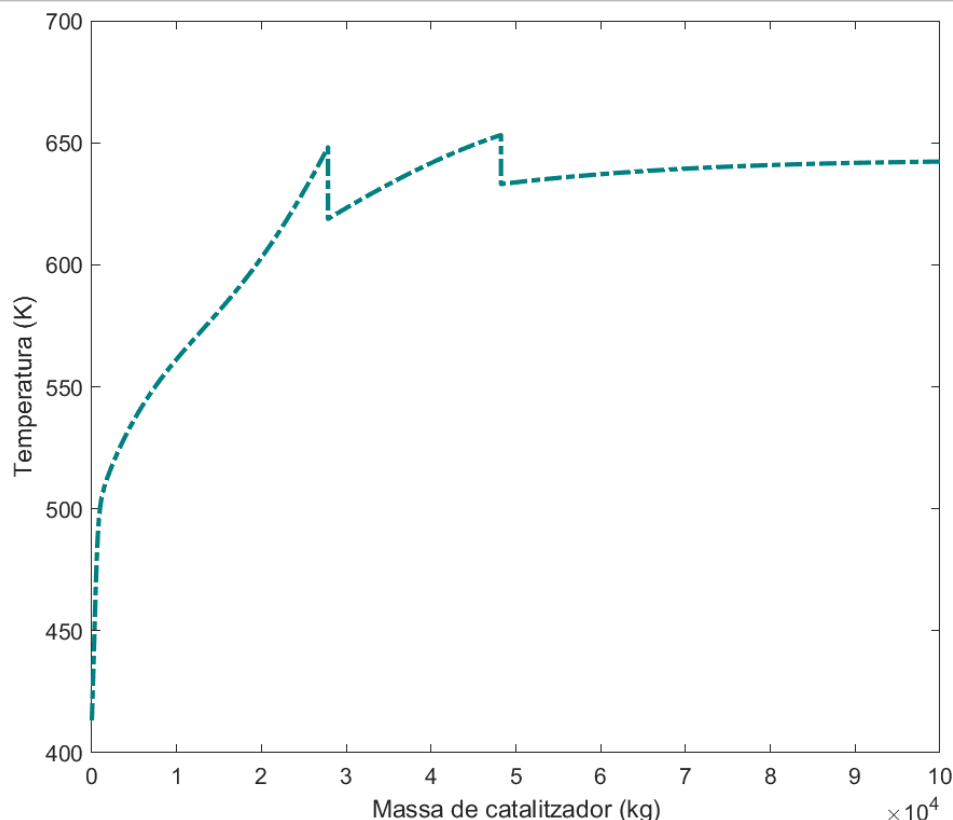


Figura A.25. Temperatura al llarg del reactor PBR per la simulació amb 7.5 mol/s de *quench*.

A partir dels resultats obtinguts, es pot concloure que utilitzar 4.5 i 5.5 mol/s de *quench* no és suficient per refrigerar adequadament el reactor per sota de la temperatura de degradació dels lípids i, per tant, els experiments no són aptes. Per altra banda, utilitzar 7.5 i 8.5 mol/s de *quench* és correcte, però innecessari, ja que el cabal de sortida d'octadecanol (D) és més elevat, resultant en experiments menys òptims (ja que el cabal d'àcid gras i alcohol gras ha de ser el mínim possible).

A.5.2 Temperatura d'injecció de *quench*

S'analitza l'impacte que té la temperatura d'injecció del *quench* sobre la producció i la temperatura màxima del reactor. La temperatura d'injecció és 323.15K, així que s'analitza l'efecte de variar la temperatura $\pm 10K$ i $\pm 20K$. Com que els compostos utilitzats en el *quench* són els productes, heptadecà i octadecà, aquests s'han d'injectar per sobre del seu punt de fusió, 21 i 28 °C, respectivament. És per això que s'escull aquest rang de temperatures. Per tant, es mostren els cabals de sortida i temperatura màxima del reactor per temperatures d'injecció de 303.15K, 313.15K, 333.15K i 343.15K a la Taula A.12. A més a més, es mostren els cabals de tots els compostos (excepte H₂), el cabal d'hidrogen i la temperatura al llarg del reactor PBR pels 4 experiments, des de la Figura A.26 fins la Figura A.37.

Taula A.12. Efecte de la variació de temperatura *quen*ch en els cabals de sortida i temperatura.

Cabals finals i temperatura màxima	303.15 K	313.15 K	333.15 K	343.15 K
Olefines	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s
Triglicèrids	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s
Propà	9.38 mol/s	9.38 mol/s	9.38 mol/s	9.38 mol/s
Àcid esteàric	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s
Octadecanal	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s
Heptadecà	12.65 mol/s	12.65 mol/s	12.66 mol/s	12.65 mol/s
Octadecanol	0.08 mol/s	0.07 mol/s	0.04 mol/s	0.03 mol/s
Octadecà	21.91 mol/s	21.93 mol/s	21.95 mol/s	21.96 mol/s
Hidrogen	278.18 mol/s	278.16 mol/s	278.14 mol/s	278.13 mol/s
Aigua	46.80 mol/s	46.82 mol/s	46.84 mol/s	46.85 mol/s
Monòxid de carboni	9.40 mol/s	9.40 mol/s	9.40 mol/s	9.40 mol/s
Temperatura màxima del reactor	653.15 K	653.15 K	654.83 K	656.02 K
Resultat	Apte	Apte	Apte	Apte

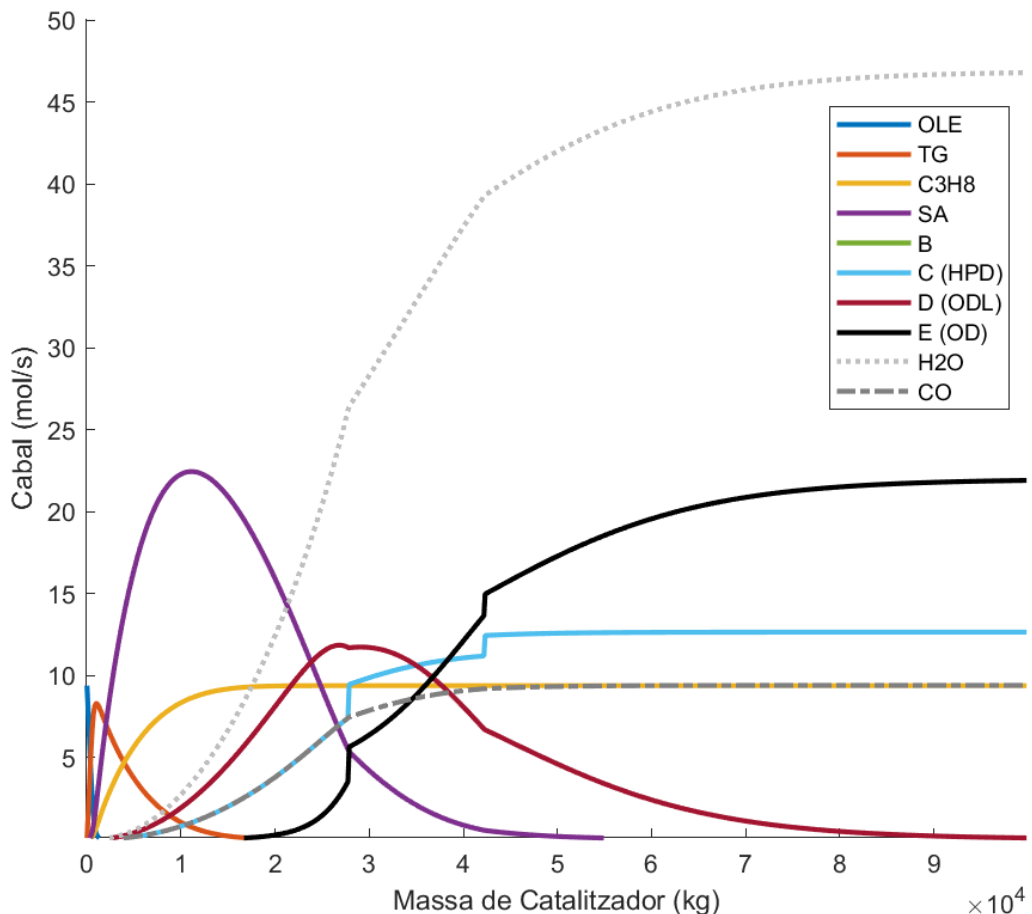


Figura A.26. Cabals de tots els compostos (excepte H₂) al llarg del reactor PBR per la simulació amb 303.15K de temperatura d'injecció *quen*ch.

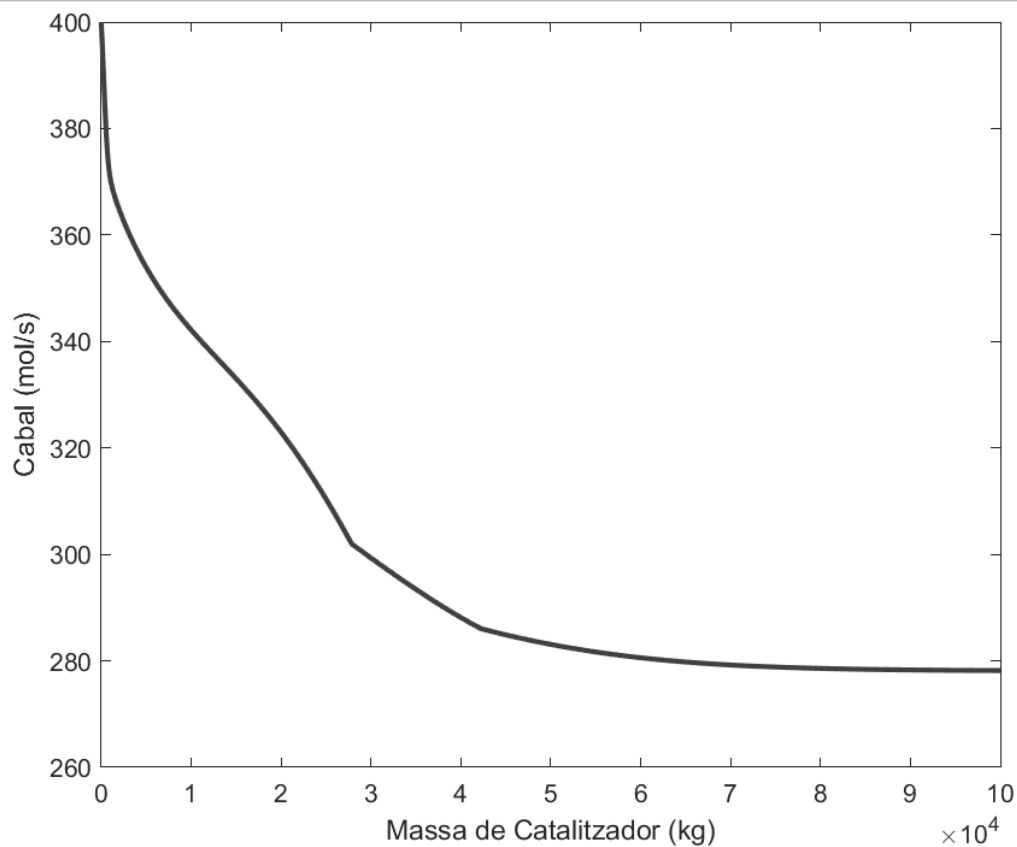


Figura A.27. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor PBR per la simulació amb 303.15K de temperatura d'injecció *quench*.

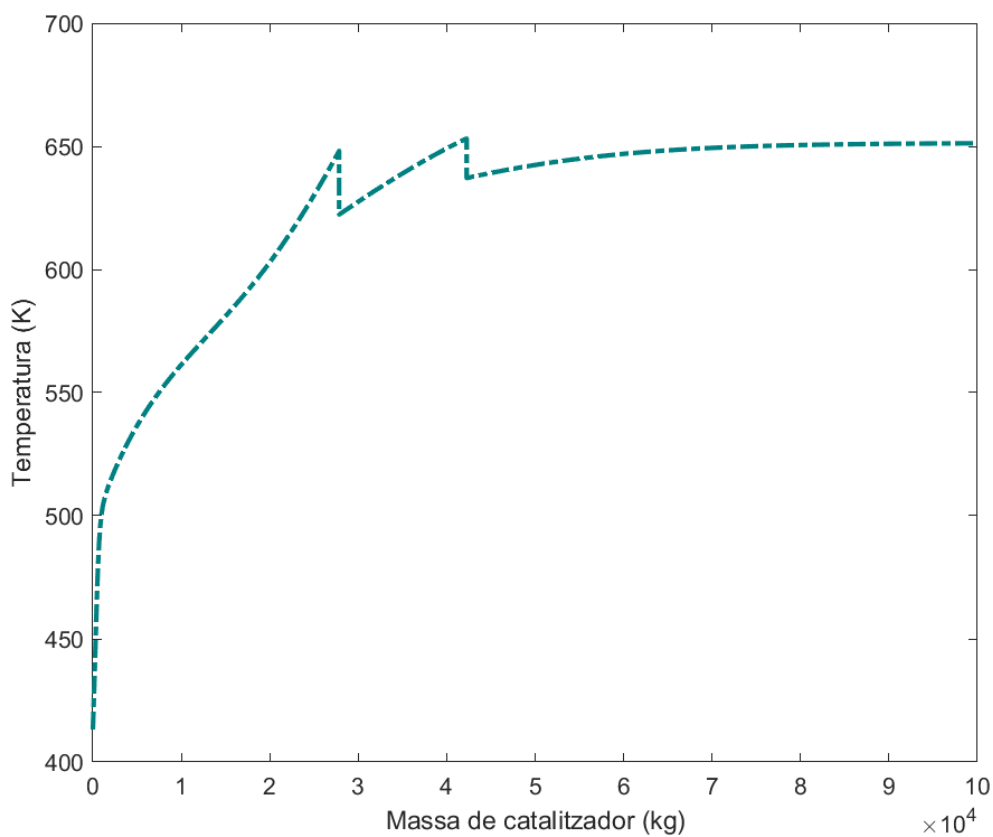


Figura A.28. Temperatura al llarg del reactor PBR per la simulació amb 303.15K de temperatura d'injecció *quench*.

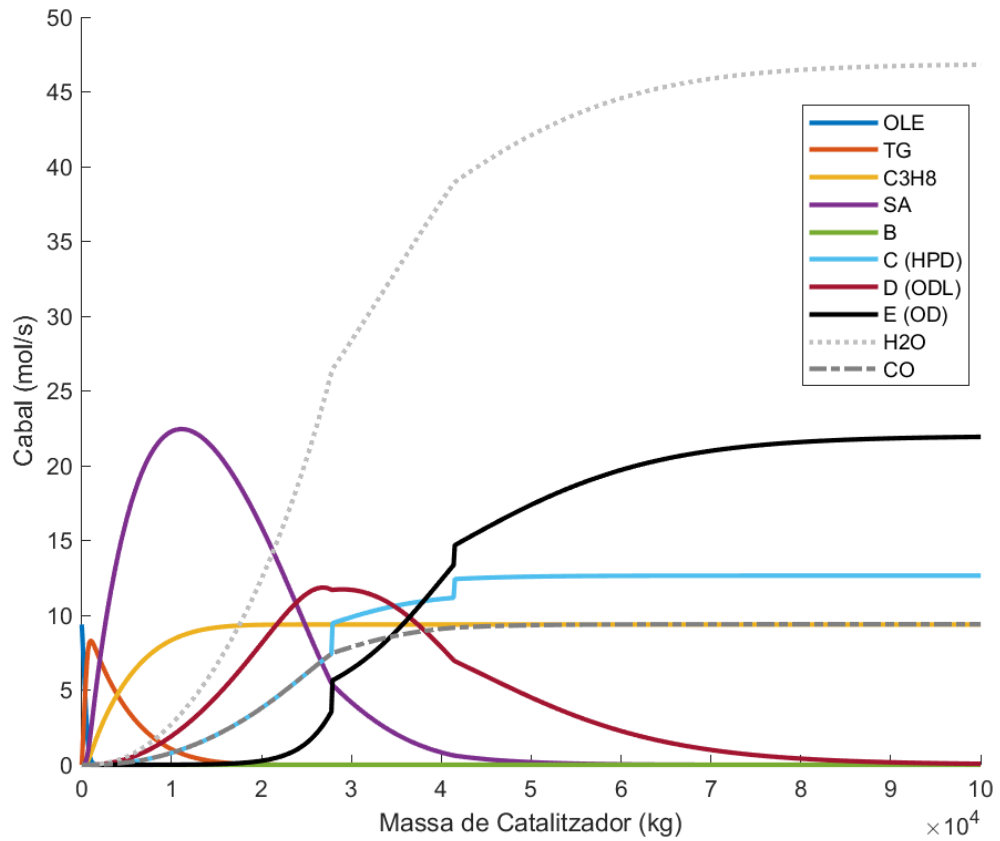


Figura A.29. Cabals de tots els compostos (excepte H₂) al llarg del reactor PBR per la simulació amb 313.15K de temperatura d'injecció *quench*.

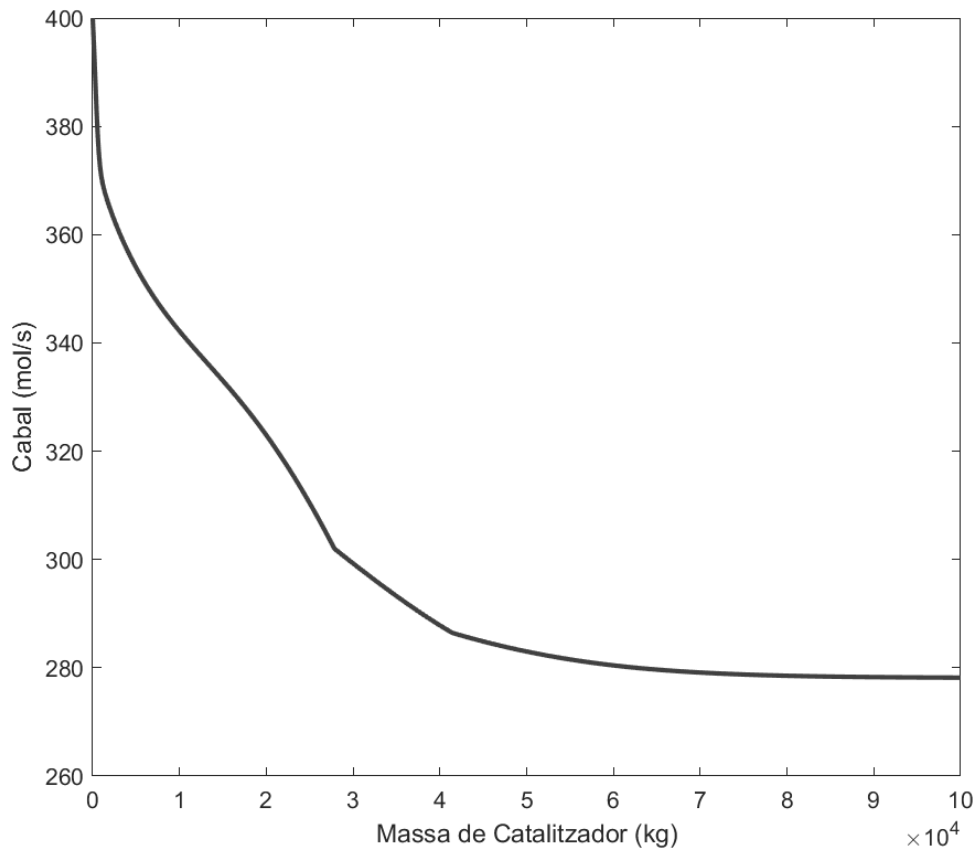


Figura A.30. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor PBR per la simulació amb 313.15K de temperatura d'injecció *quench*.

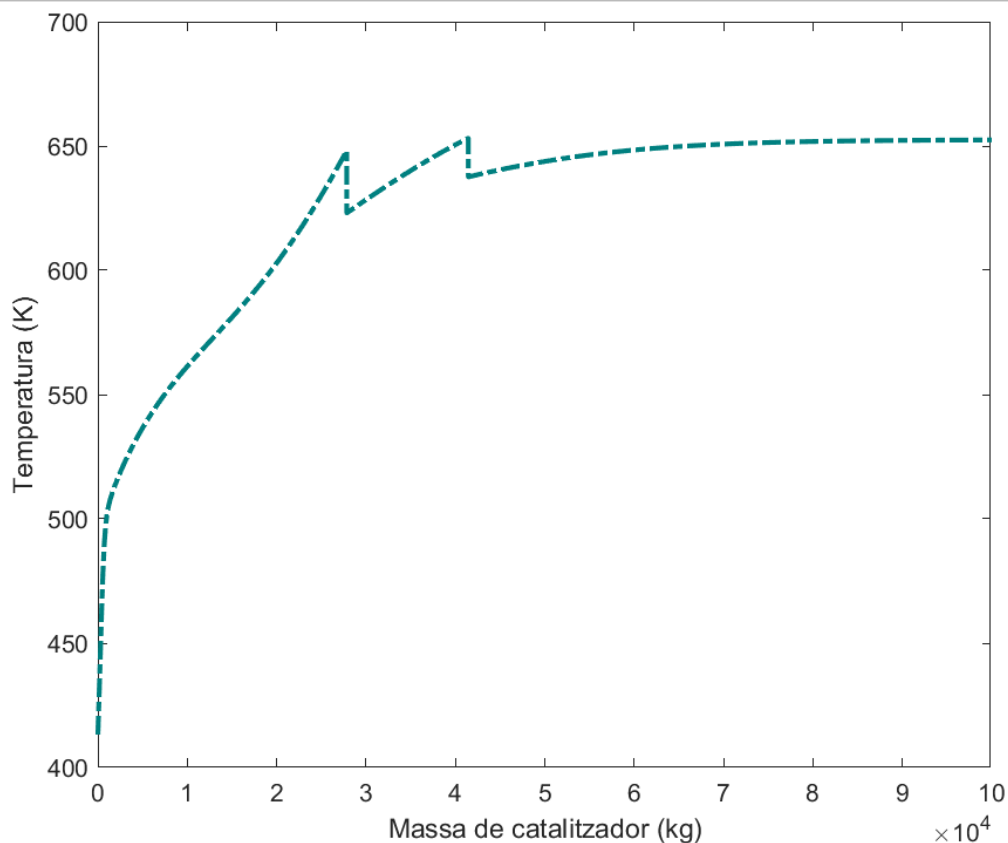


Figura A.31. Temperatura al llarg del reactor PBR per la simulació amb 313.15K de temperatura d'injecció *quench*.

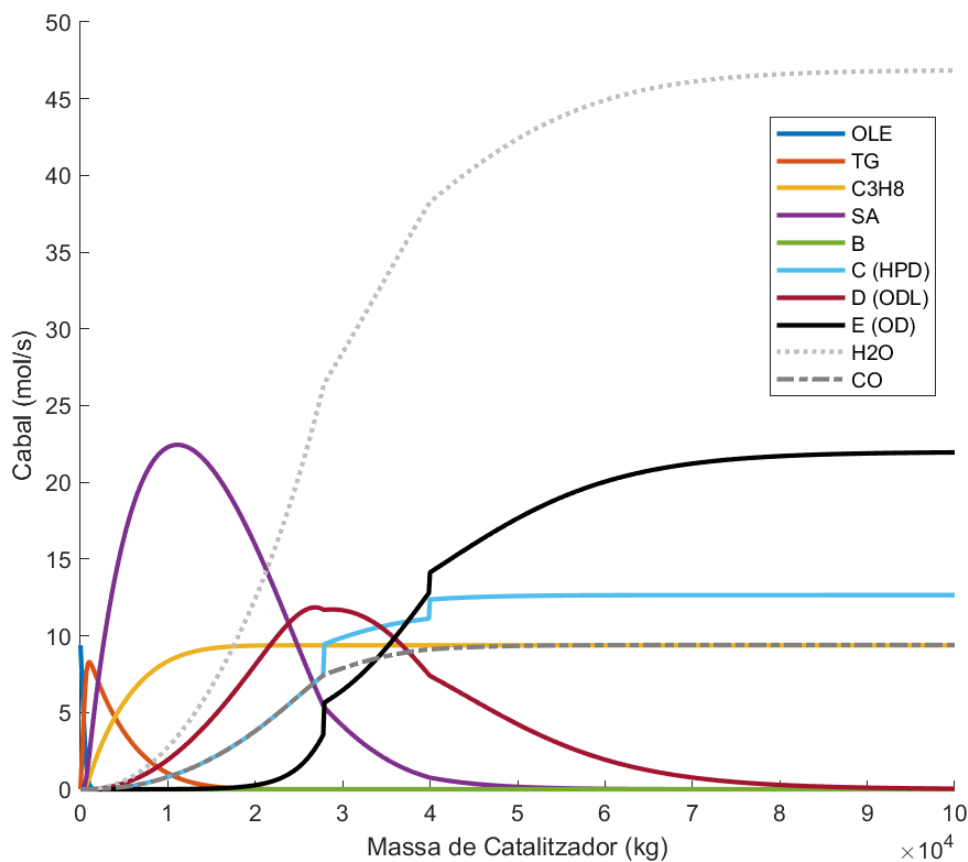


Figura A.32. Cabals de tots els compostos (excepte H₂) al llarg del reactor PBR per la simulació amb 333.15K de temperatura d'injecció *quench*.

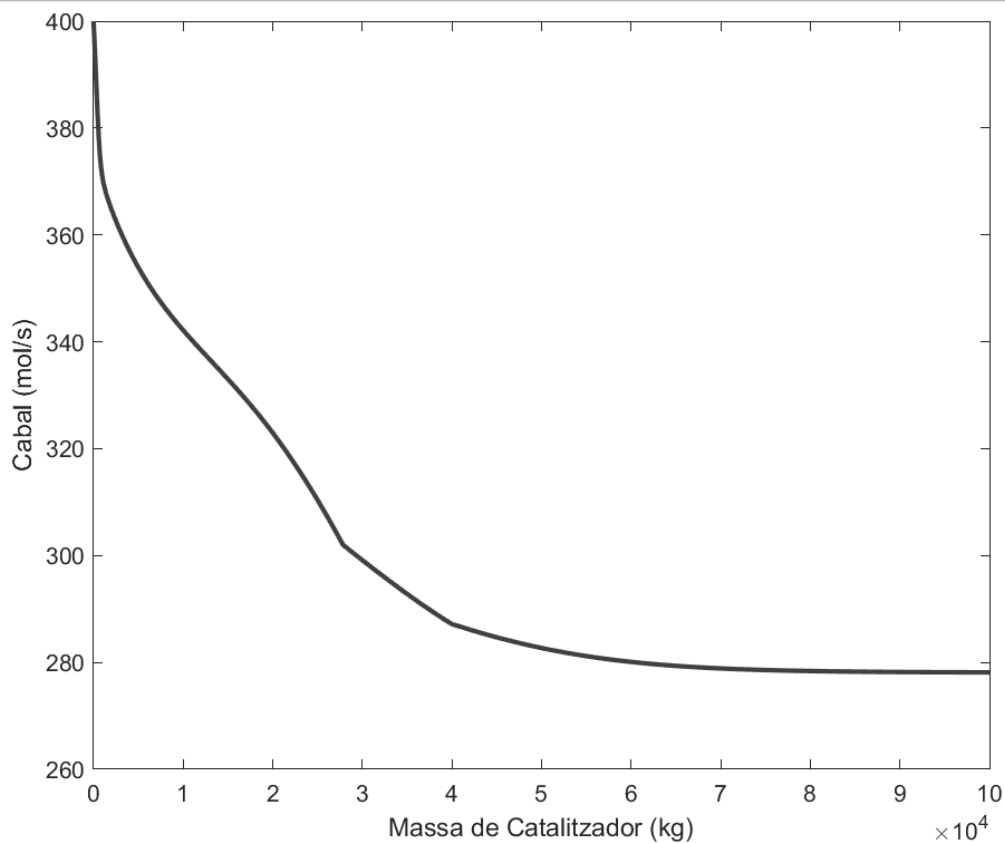


Figura A.33. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor PBR per la simulació amb 333.15K de temperatura d'injecció *quen*ch.

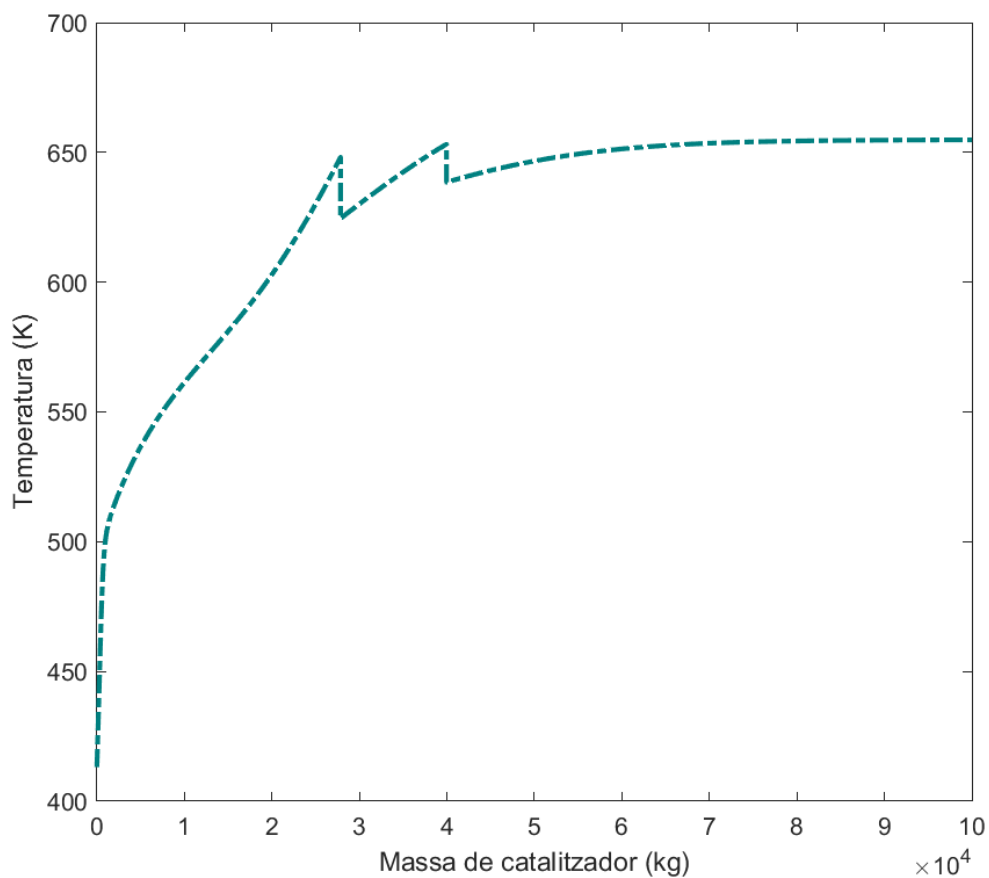


Figura A.34. Temperatura al llarg del reactor PBR per la simulació amb 333.15K de temperatura d'injecció *quen*ch.

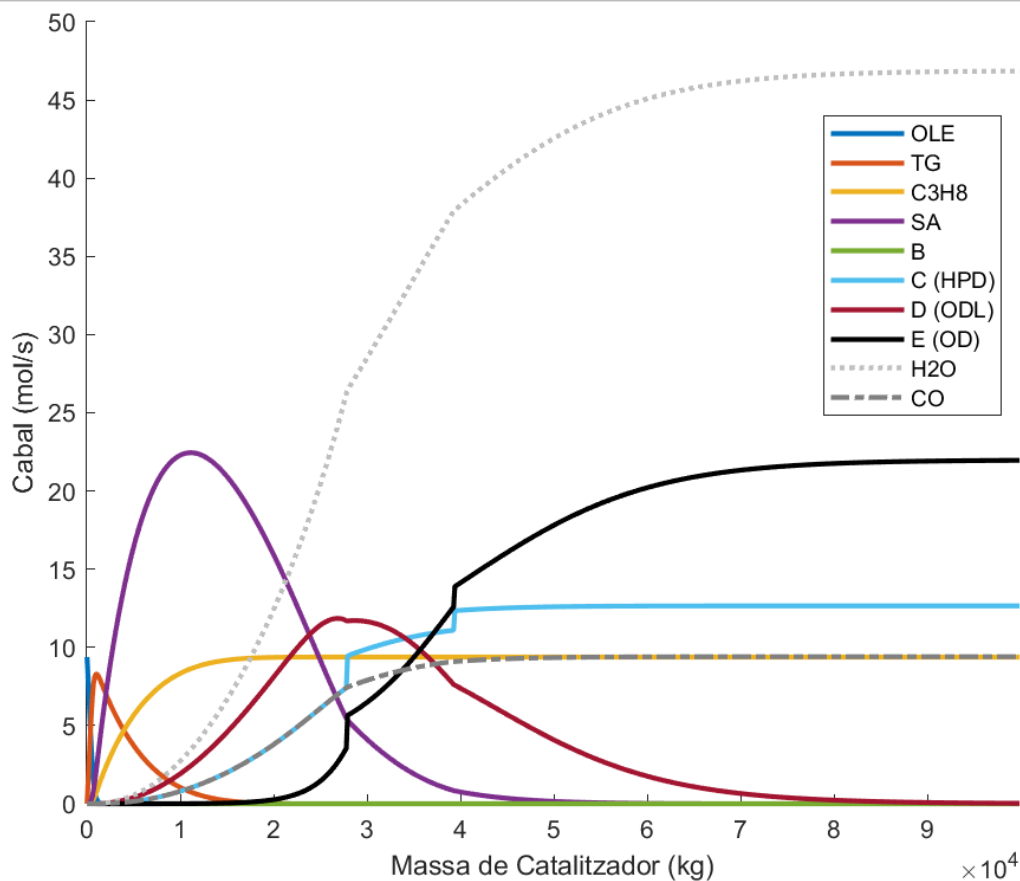


Figura A.35. Cabals de tots els compostos (excepte H₂) al llarg del reactor PBR per la simulació amb 343.15K de temperatura d'injecció *quench*.

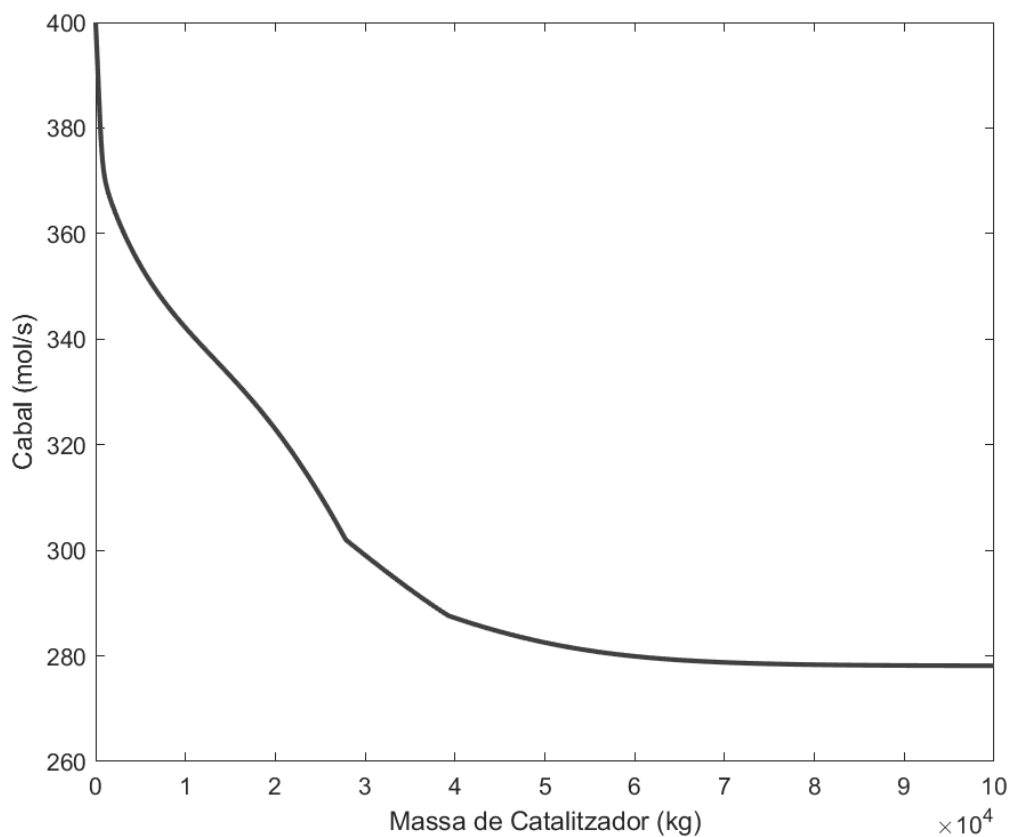


Figura A.36. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor PBR per la simulació amb 343.15K de temperatura d'injecció *quench*.

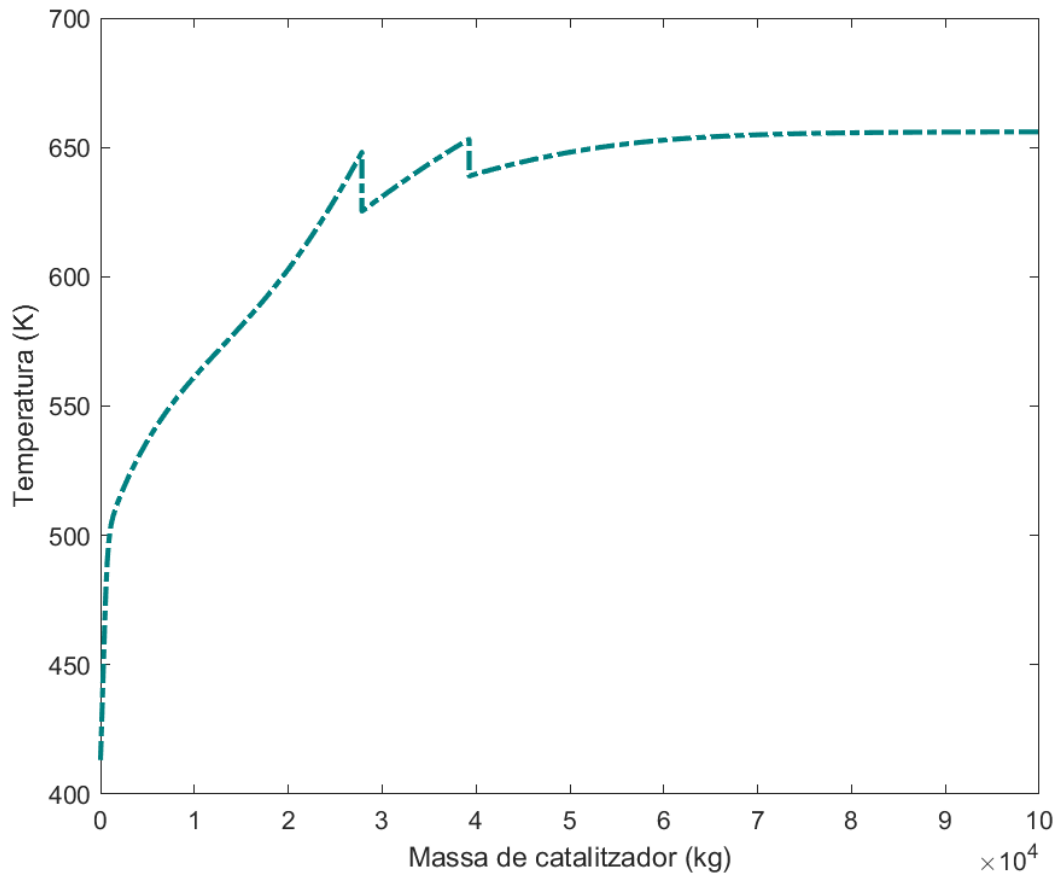


Figura A.37. Temperatura al llarg del reactor PBR per la simulació amb 343.15K de temperatura d'injecció *quench*.

A partir dels resultats obtinguts, es pot concloure que la temperatura d'injecció *quench* té més marge de treball que el cabal del mateix. Malgrat això, injectar a 333.15K i 343.15K fa que la temperatura màxima s'apropi massa a la temperatura de degradació dels lípids i injectar a 303.15K i 313.15K resulta en una producció lleugerament menor. Per tant, la temperatura òptima per injectar el *quench* és 323.15K. Tanmateix, es pot concloure que no és necessari refrigerar aquests *quench* a una temperatura propera a l'ambient, ja que l'efecte no és rellevant. Aquest aspecte estalvia costos operacionals i evita sobredimensionar les etapes de refrigeració dels productes finals, reduint el consum d'*utilities*.

A.5.3 Temperatura d'alimentació al reactor PBR

S'analitza l'efecte que té la temperatura d'alimentació a l'entrada del reactor sobre els cabals de sortida i la temperatura màxima assolida al mateix. La temperatura d'alimentació és de 413.15K, per tant, s'analitza l'impacte que té alimentar a $\pm 20\text{K}$ i $\pm 40\text{K}$. Es mostren els cabals de sortida i temperatura màxima del reactor per temperatures d'alimentació de 373.15K, 393.15K, 433.15K i 453.15K a la Taula A.13. A més a més, es mostren els cabals de tots els compostos (excepte H₂), el cabal d'hidrogen i la temperatura al llarg del reactor PBR, des de la Figura A.38 fins la Figura A.49.

Taula A.13. Efecte del canvi de temperatura d'alimentació en els cabals de sortida i temperatura.

Cabals finals i temperatura màxima	373.15 K	393.15 K	433.15 K	453.15 K
Olefines	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s
Triglicèrids	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s
Propà	9.38 mol/s	9.38 mol/s	9.38 mol/s	9.38 mol/s
Àcid esteàric	1.43 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s
Octadecanal	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s
Heptadecà	8.40 mol/s	11.18 mol/s	12.83 mol/s	12.98 mol/s
Octadecanol	12.90 mol/s	0.63 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s
Octadecà	5.41 mol/s	20.33 mol/s	21.28 mol/s	21.66 mol/s
Hidrogen	293.30 mol/s	278.30 mol/s	278.45 mol/s	278.76 mol/s
Aigua	32.12 mol/s	46.46 mol/s	46.70 mol/s	46.55 mol/s
Monòxid de carboni	8.40 mol/s	9.18 mol/s	9.58 mol/s	9.73 mol/s
Temperatura màxima del reactor	626.04 K	650.68 K	670.62 K	687.50 K
Resultat	No apte	Apte	No apte	No apte

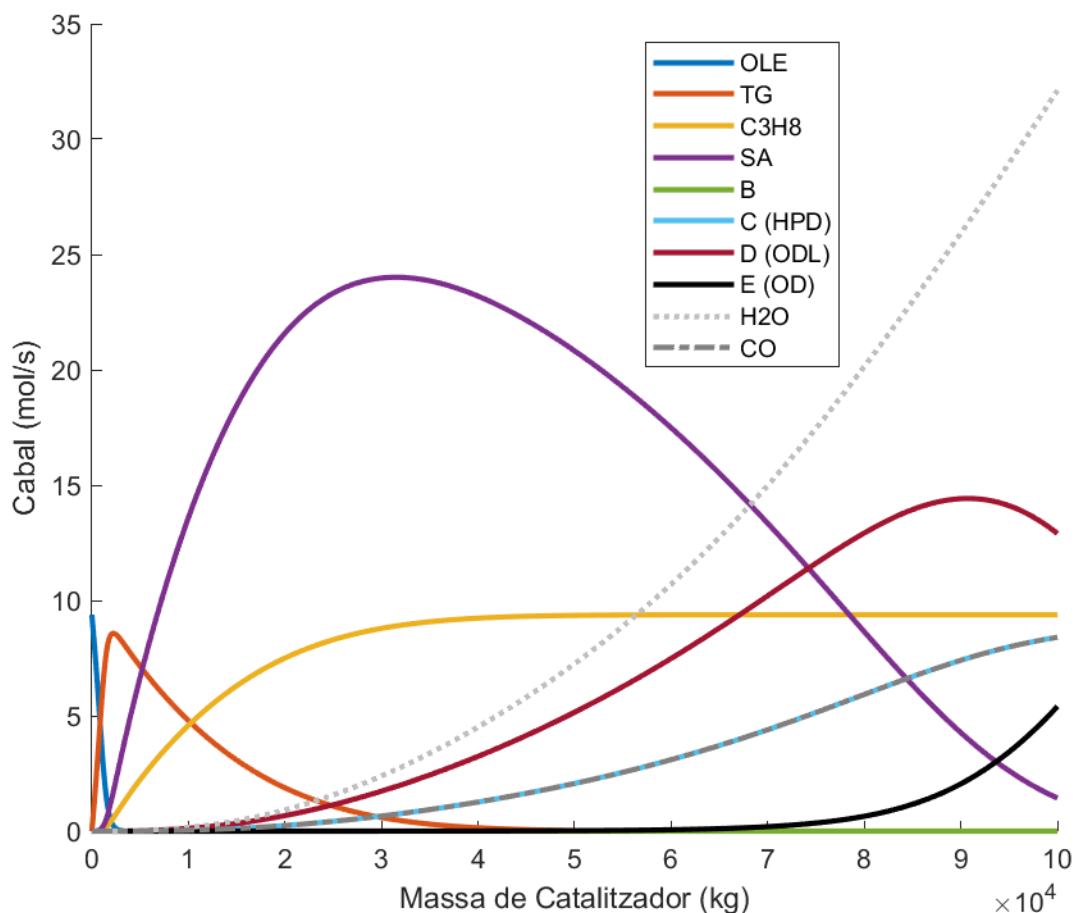


Figura A.38. Cabals de tots els compostos (excepte H₂) al llarg del reactor PBR per la simulació amb 373.15K de temperatura d'alimentació al reactor.

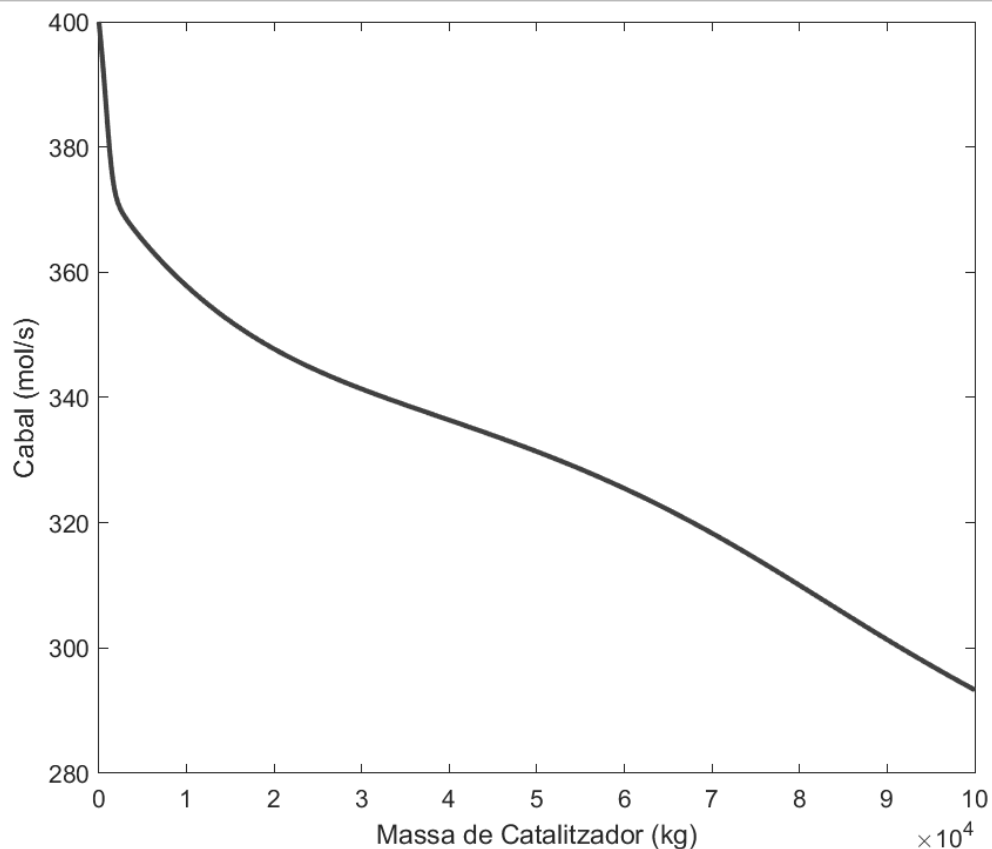


Figura A.39. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor PBR per la simulació amb 373.15K de temperatura d'alimentació al reactor.

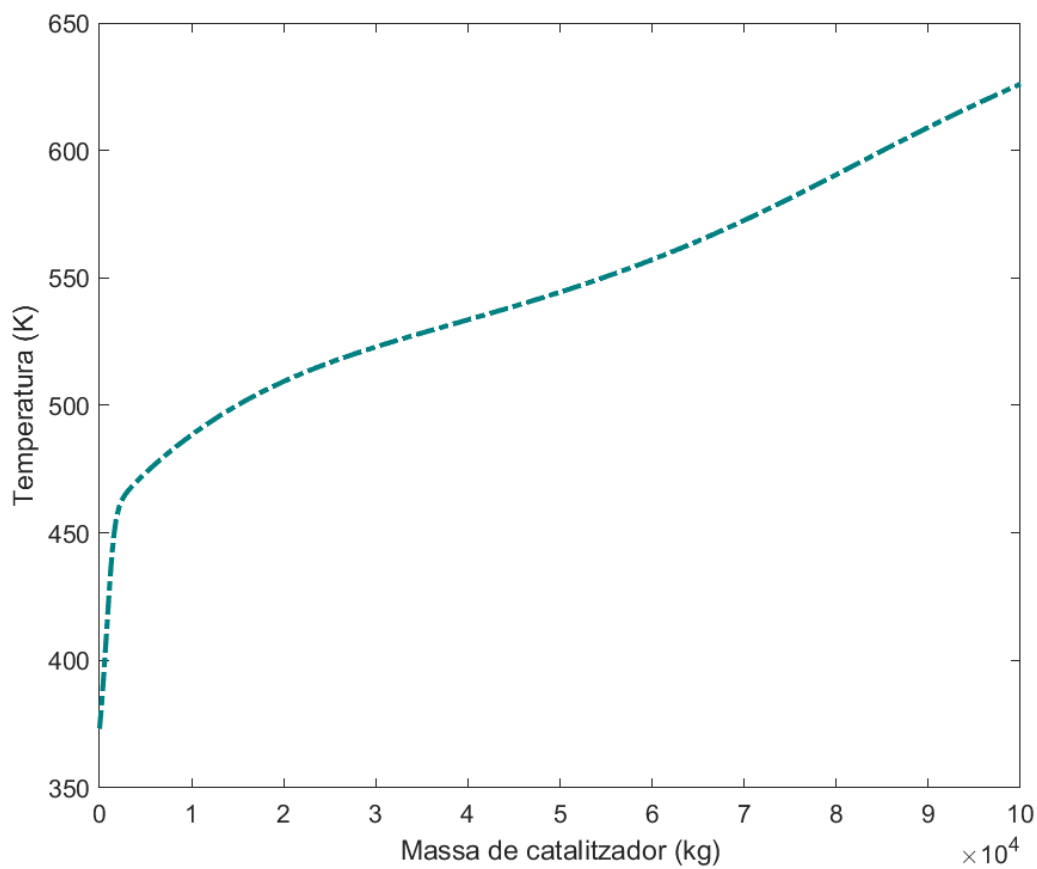


Figura A.40. Temperatura al llarg del reactor PBR per la simulació amb 373.15K de temperatura d'alimentació al reactor.

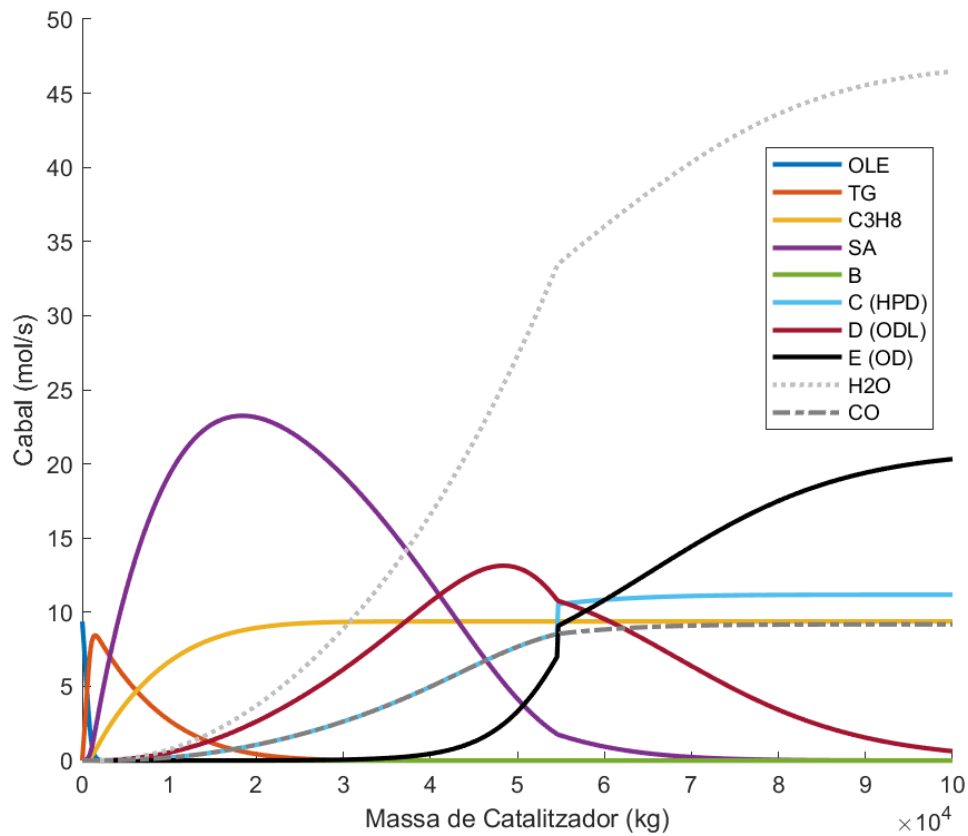


Figura A.41. Cabals de tots els compostos (excepte H₂) al llarg del reactor PBR per la simulació amb 393.15K de temperatura d'alimentació al reactor.

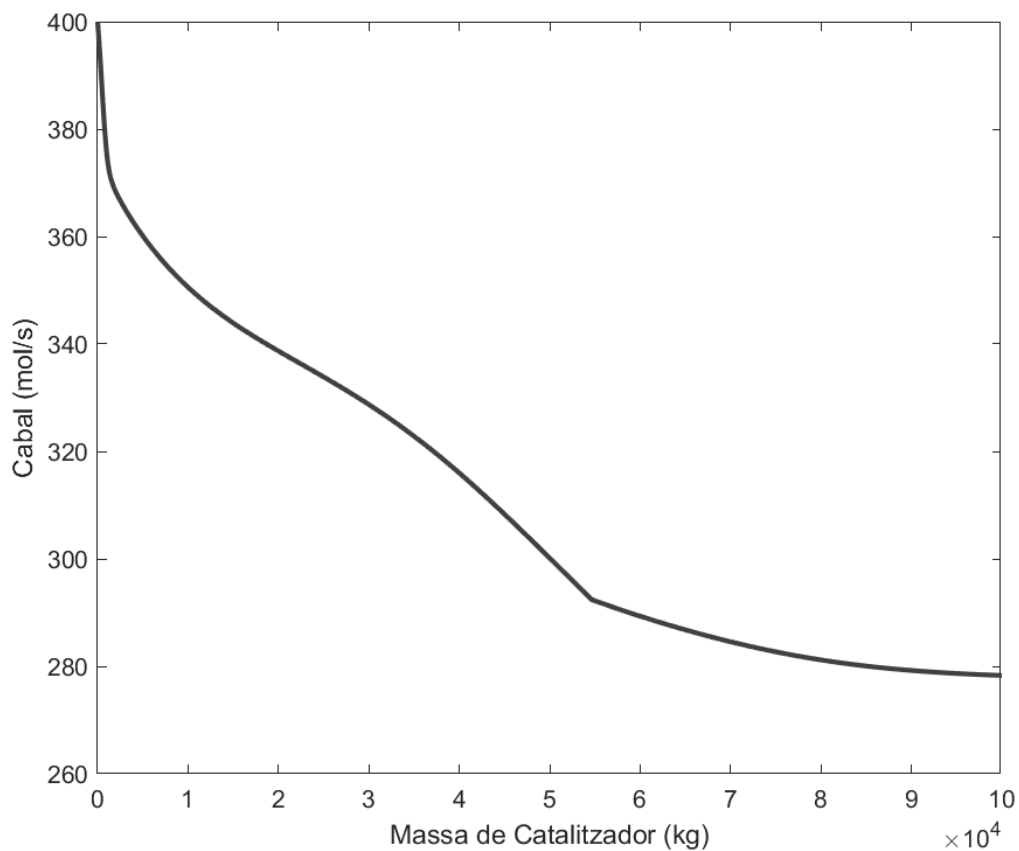


Figura A.42. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor PBR per la simulació amb 393.15K de temperatura d'alimentació al reactor.

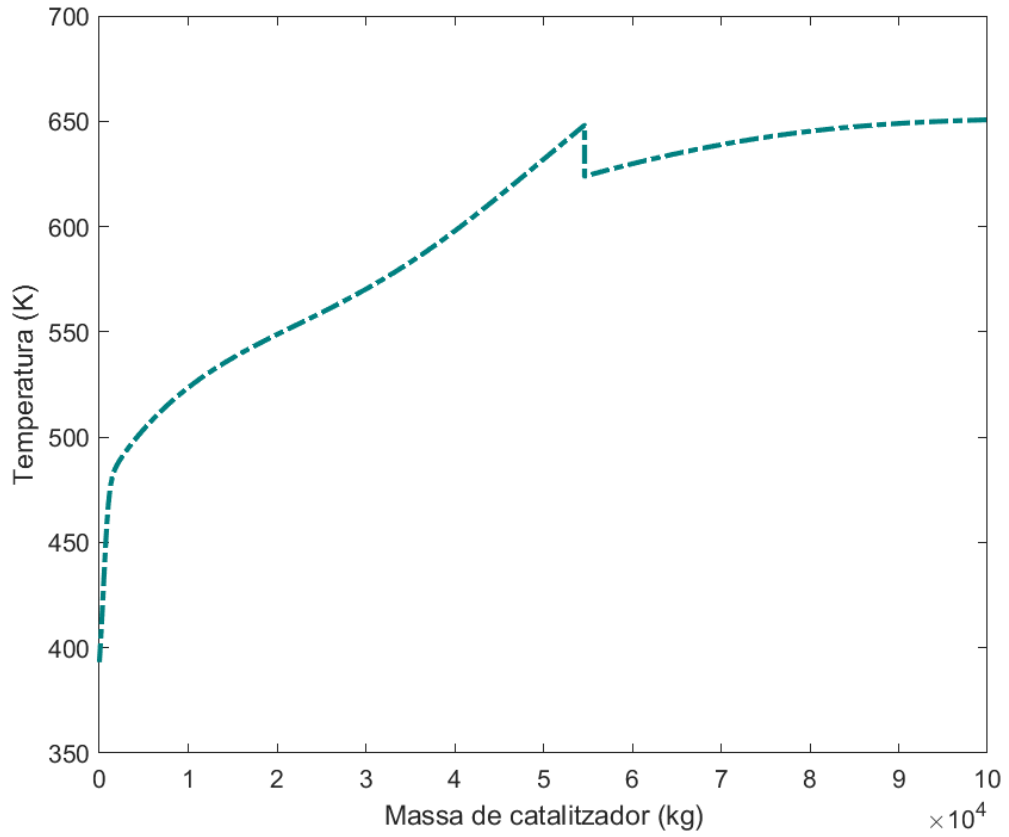


Figura A.43. Temperatura al llarg del reactor PBR per la simulació amb 393.15K de temperatura d'alimentació al reactor.

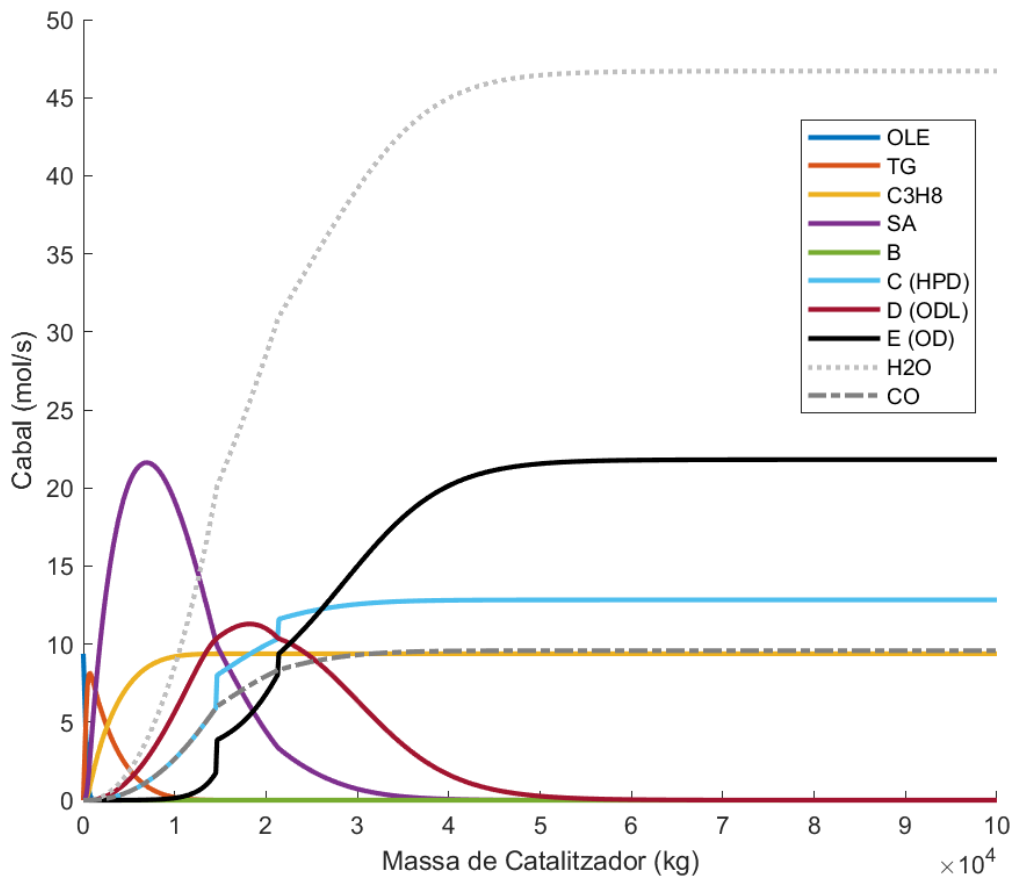


Figura A.44. Cabals de tots els compostos (excepte H₂) al llarg del reactor PBR per la simulació amb 433.15K de temperatura d'alimentació al reactor.

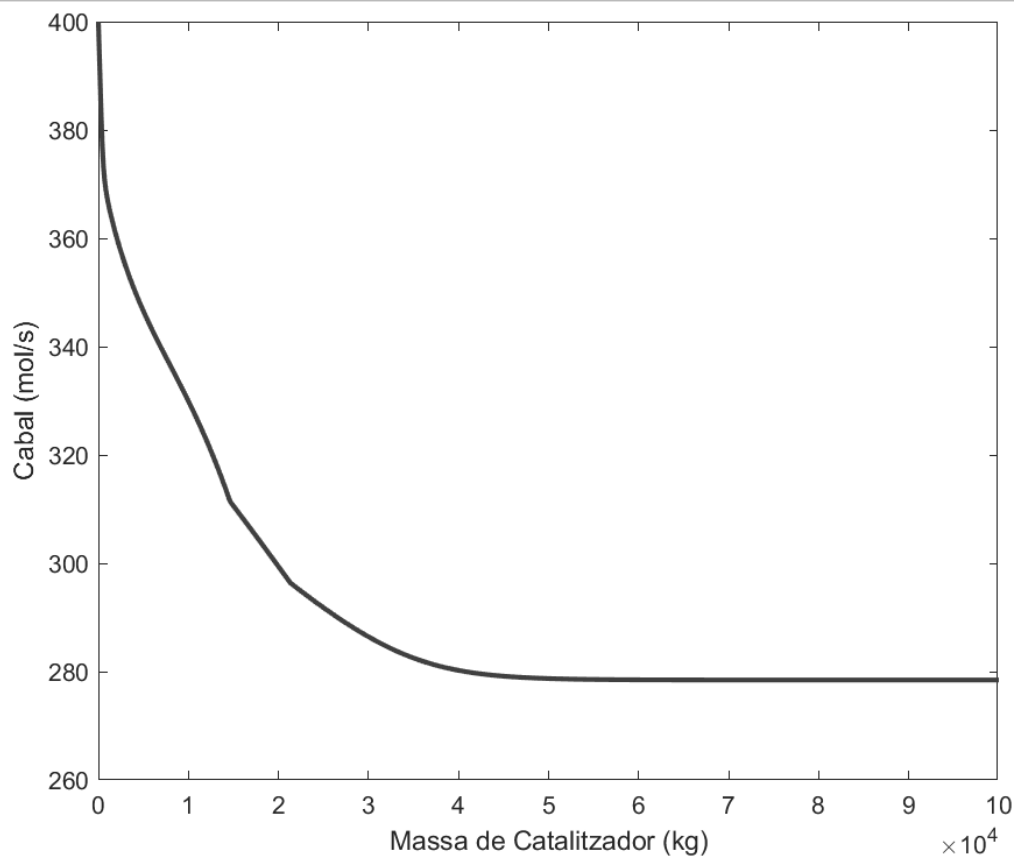


Figura A.45. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor PBR per la simulació amb 433.15K de temperatura d'alimentació al reactor.

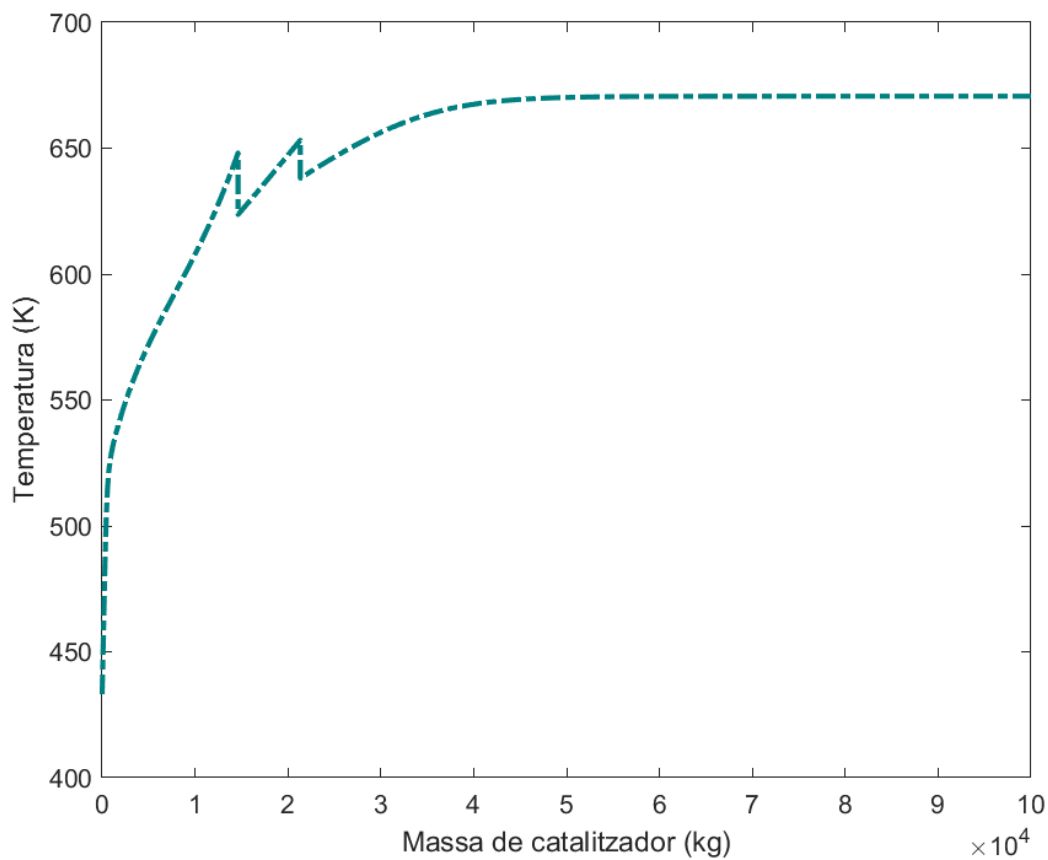


Figura A.46. Temperatura al llarg del reactor PBR per la simulació amb 433.15K de temperatura d'alimentació al reactor.

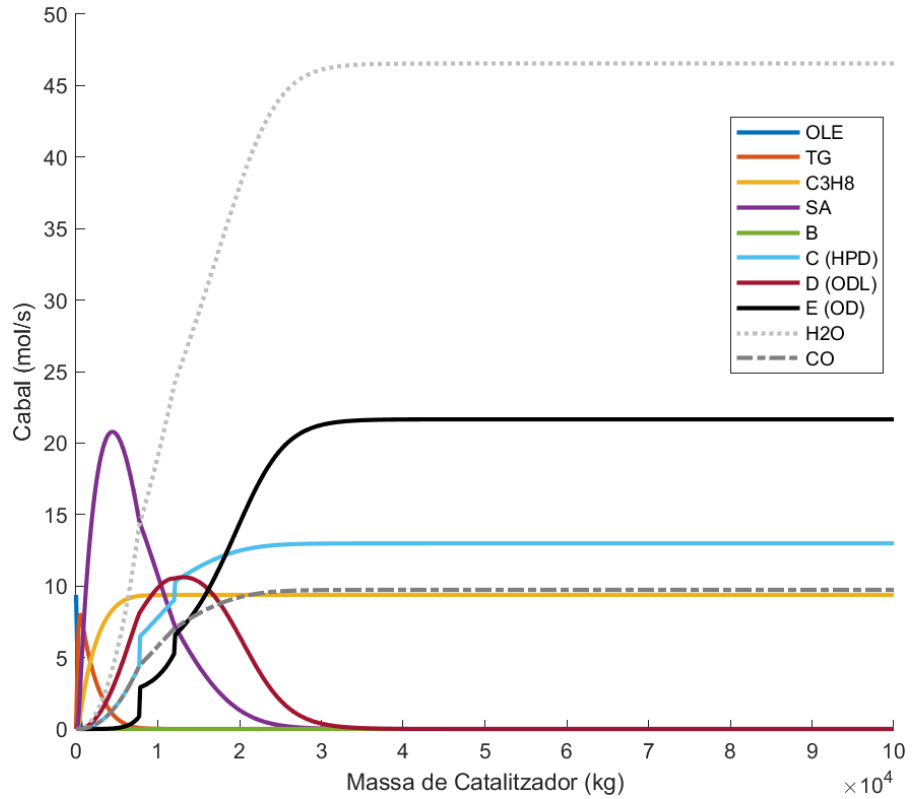


Figura A.47. Cabals de tots els compostos (excepte H₂) al llarg del reactor PBR per la simulació amb 453.15K de temperatura d'alimentació al reactor.

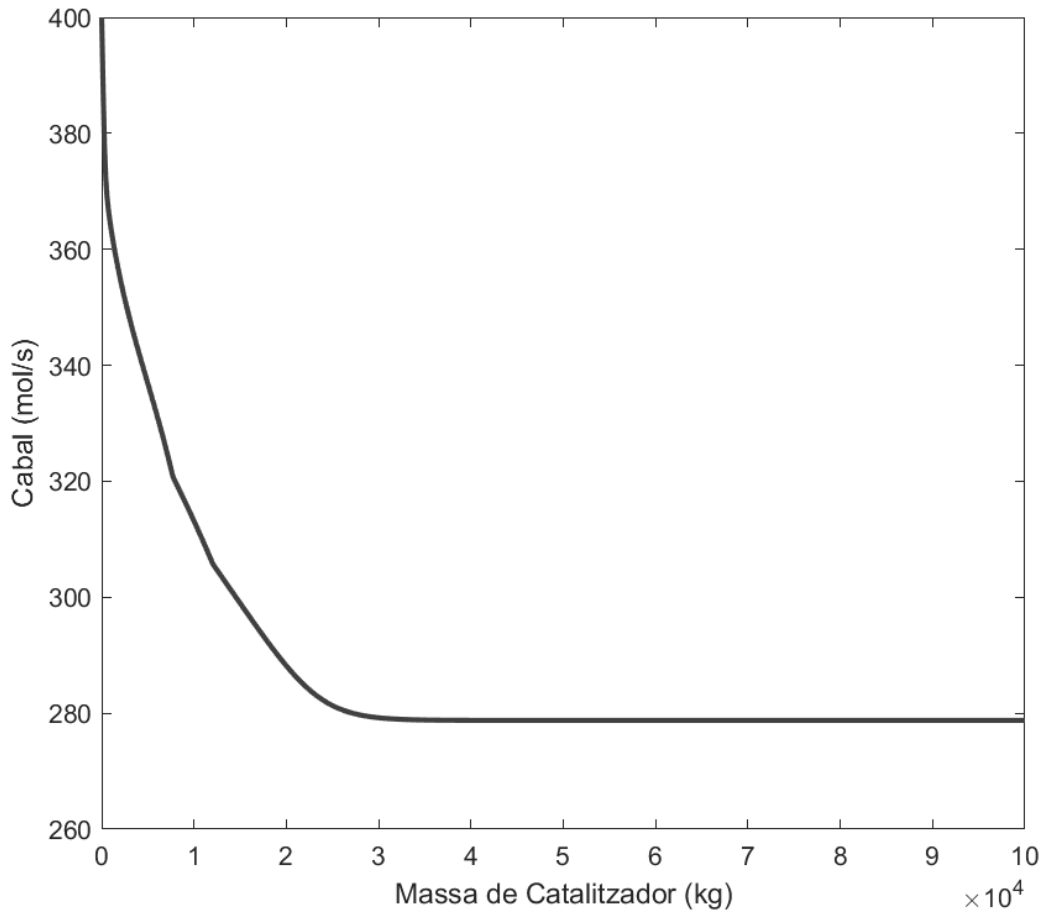


Figura A.48. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor PBR per la simulació amb 453.15K de temperatura d'alimentació al reactor.

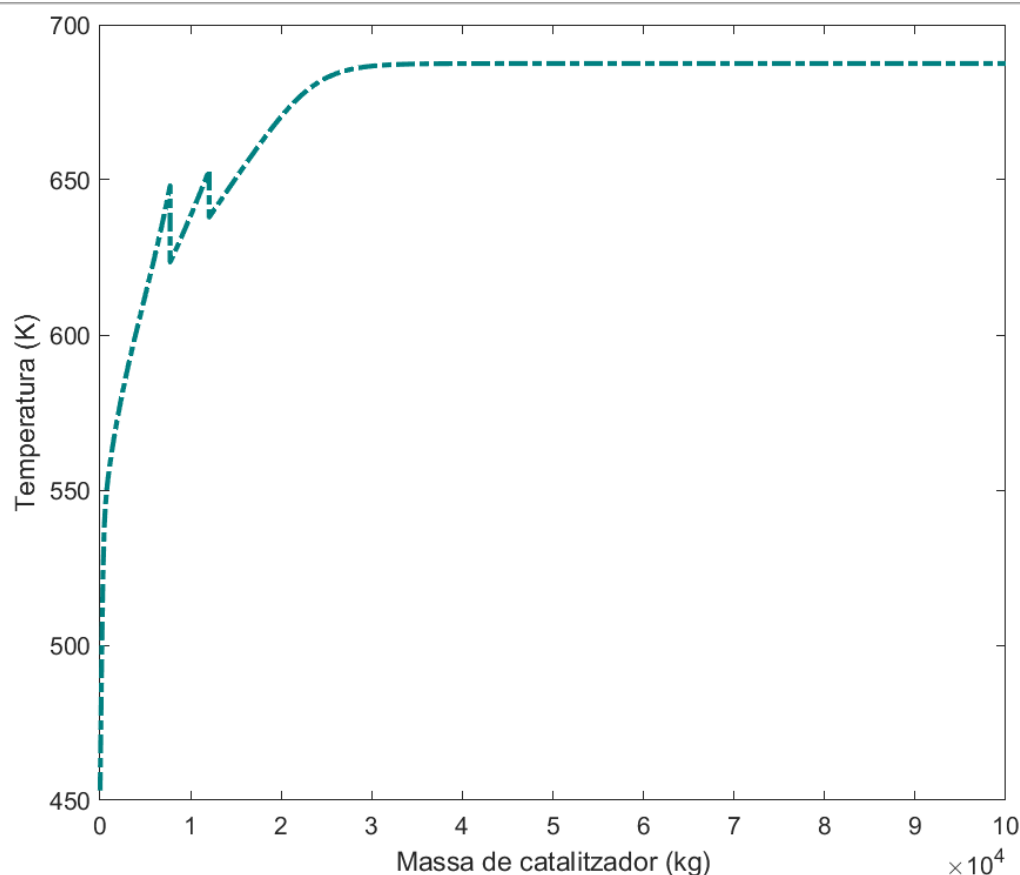


Figura A.49. Temperatura al llarg del reactor PBR per la simulació amb 453.15K de temperatura d'alimentació al reactor.

A partir dels resultats obtinguts, es pot concloure que no hi ha molt marge de treball en quant a la temperatura de l'alimentació del reactor PBR. Disminuir més de 20 graus la temperatura d'alimentació causa que la producció sigui molt baixa i augmentar aquesta temperatura causa que sigui més fàcil arribar a la degradació dels lípids. Per tant, alimentar a 413.15K és un balanç adient entre conversió de triglicèrids i control de temperatura a l'interior del reactor PBR.

A.5.4 Cabal d'hidrogen a l'alimentació del reactor PBR

S'analitza l'efecte que té el cabal d'hidrogen a l'alimentació del reactor PBR sobre la producció i la temperatura màxima assolida del mateix. El cabal d'hidrogen alimentat és de 400 mol/s, per tant, s'analitza l'impacte que té alimentar cabals d'hidrogen de ± 50 mol/s i ± 100 mol/s. Es mostren els cabals de sortida i la temperatura màxima del reactor per cabals d'hidrogen de 300, 350, 450 i 500 mol/s a la Taula A.14. A més a més, es mostren els cabals de tots els compostos (excepte H_2), el cabal d'hidrogen i la temperatura al llarg del reactor PBR, des de la Figura A.50 fins la Figura A.61.

Taula A.14. Efecte del canvi de cabal d'alimentació d'H₂ en els cabals de sortida i temperatura.

Cabals finals i temperatura màxima	300 mol/s	350 mol/s	450 mol/s	500 mol/s
Olefines	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s
Triglicèrids	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s
Propà	9.38 mol/s	9.38 mol/s	9.38 mol/s	9.38 mol/s
Àcid esteàric	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s
Octadecanal	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.00 mol/s
Heptadecà	13.04 mol/s	12.82 mol/s	12.50 mol/s	11.13 mol/s
Octadecanol	0.00 mol/s	0.00 mol/s	0.24 mol/s	0.15 mol/s
Octadecà	21.60 mol/s	21.82 mol/s	21.90 mol/s	20.86 mol/s
Hidrogen	178.89 mol/s	228.45 mol/s	328.05 mol/s	377.71 mol/s
Aigua	46.49 mol/s	46.71 mol/s	46.79 mol/s	47.00 mol/s
Monòxid de carboni	9.79 mol/s	9.57 mol/s	9.25 mol/s	9.13 mol/s
Temperatura màxima del reactor	670.26 K	661.77 K	653.15 K	652.92 K
Resultat	No apte	No apte	Apte	Apte

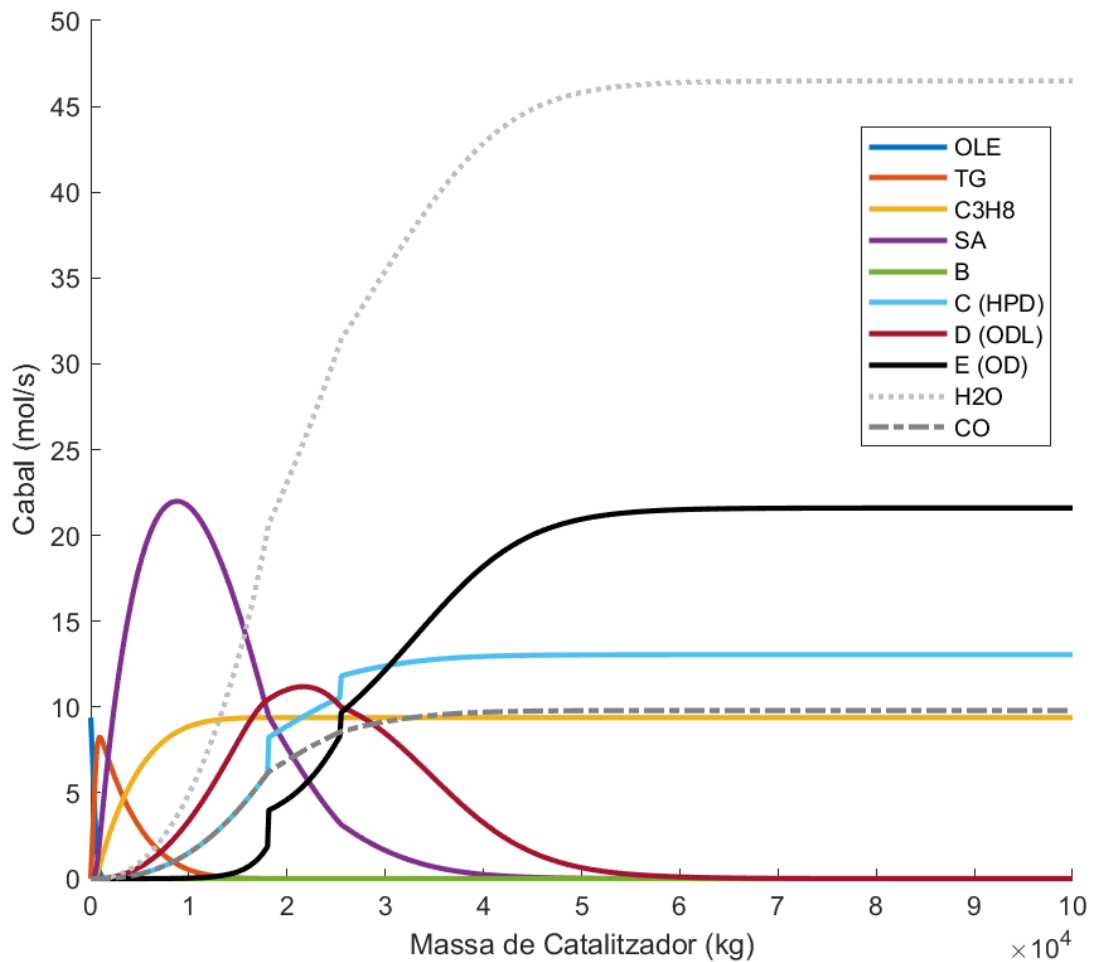


Figura A.50. Cabals de tots els compostos (excepte H₂) al llarg del reactor PBR per la simulació amb 300 mol/s d'hidrogen d'alimentació al reactor.

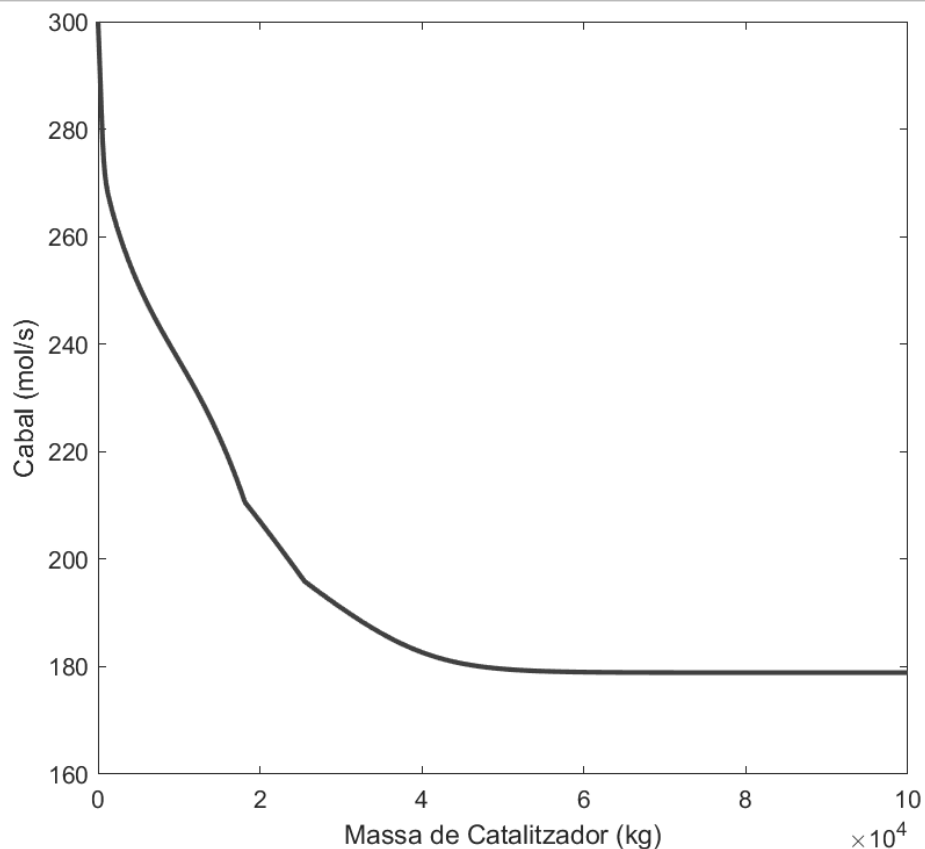


Figura A.51. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor PBR per la simulació amb 300 mol/s d'hidrogen d'alimentació al reactor.

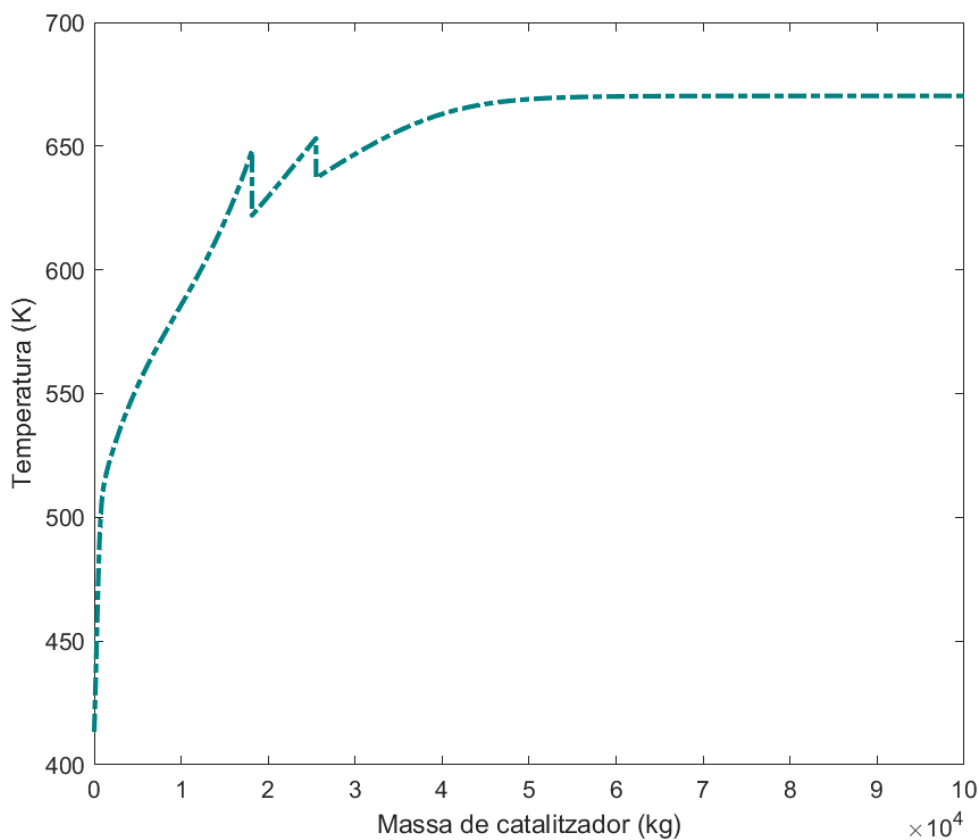


Figura A.52. Temperatura al llarg del reactor PBR per la simulació amb 300 mol/s d'hidrogen d'alimentació al reactor.

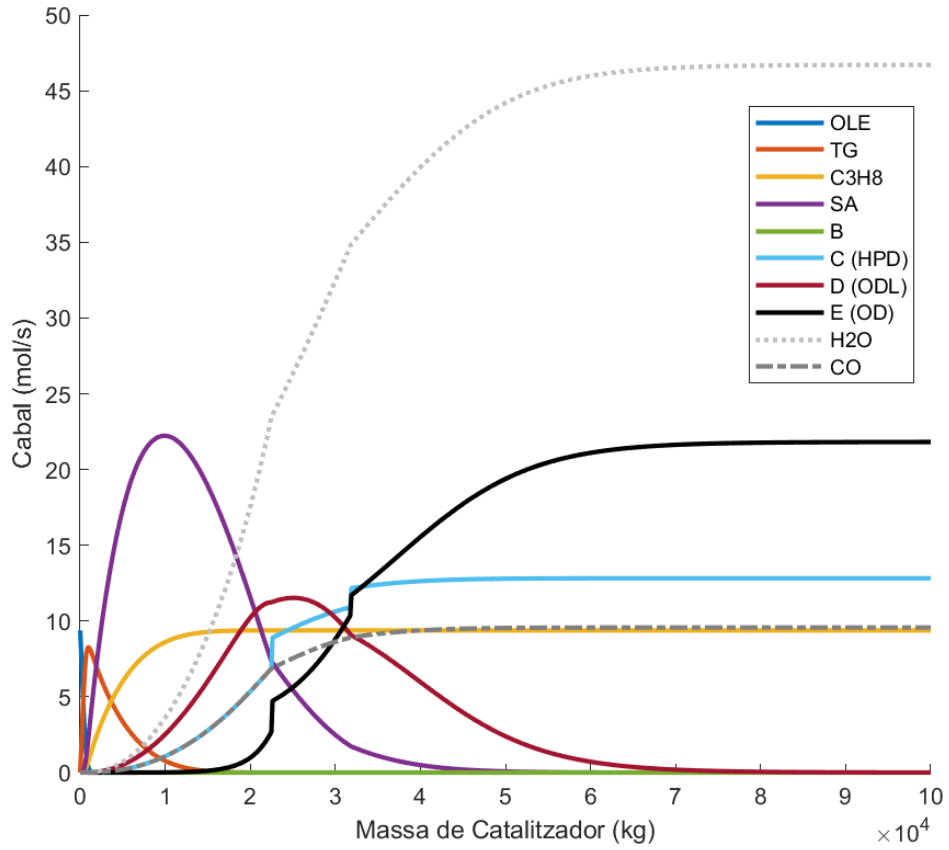


Figura A.53. Cabals de tots els compostos (excepte H₂) al llarg del reactor PBR per la simulació amb 350 mol/s d'hidrogen d'alimentació al reactor.

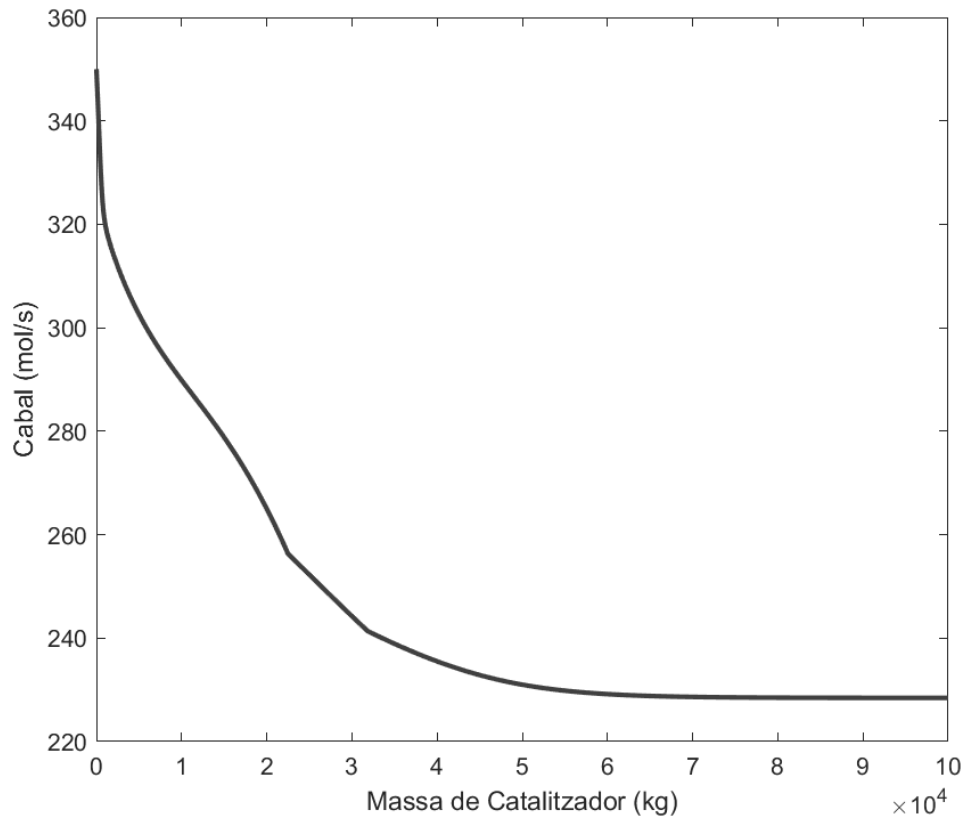


Figura A.54. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor PBR per la simulació amb 350 mol/s d'hidrogen d'alimentació al reactor.

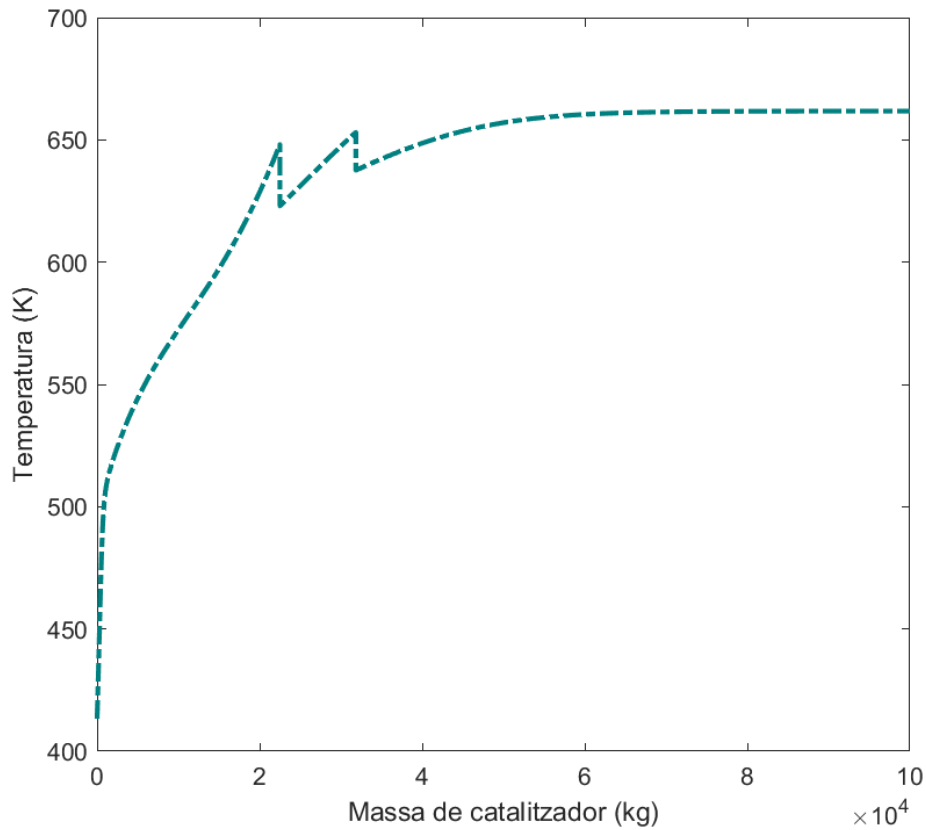


Figura A.55. Temperatura al llarg del reactor PBR per la simulació amb 350 mol/s d'hidrogen d'alimentació al reactor.

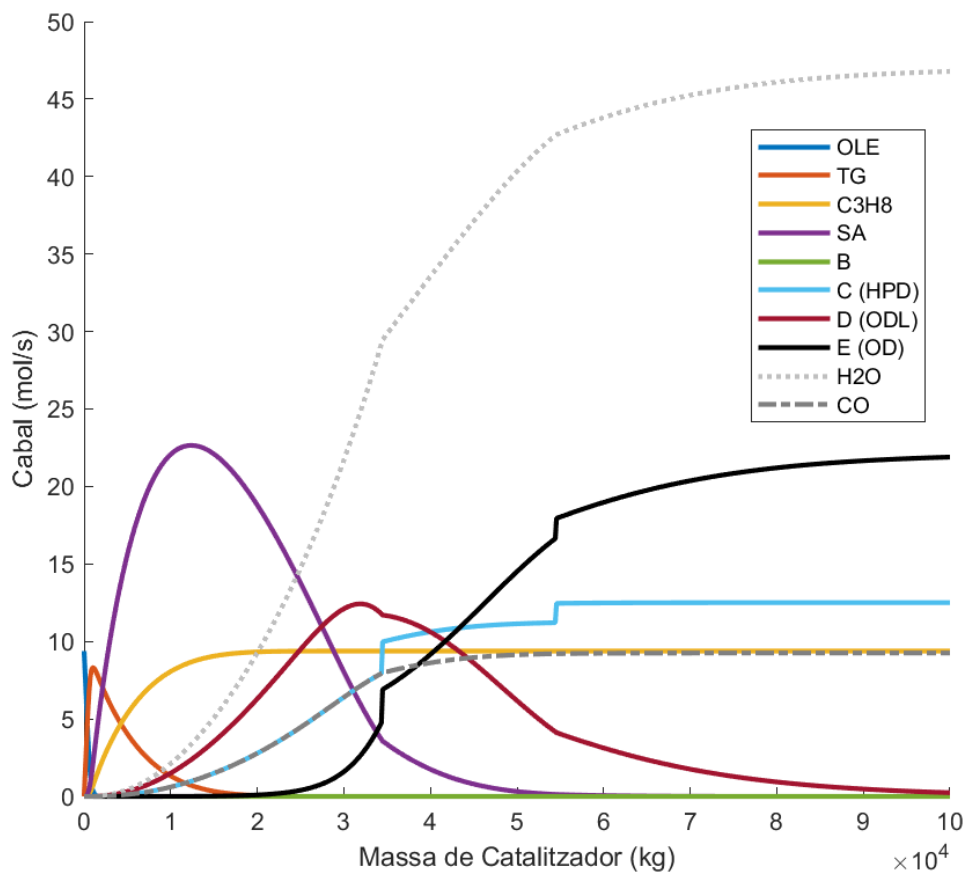


Figura A.56. Cabals de tots els compostos (excepte H₂) al llarg del reactor PBR per la simulació amb 450 mol/s d'hidrogen d'alimentació al reactor.

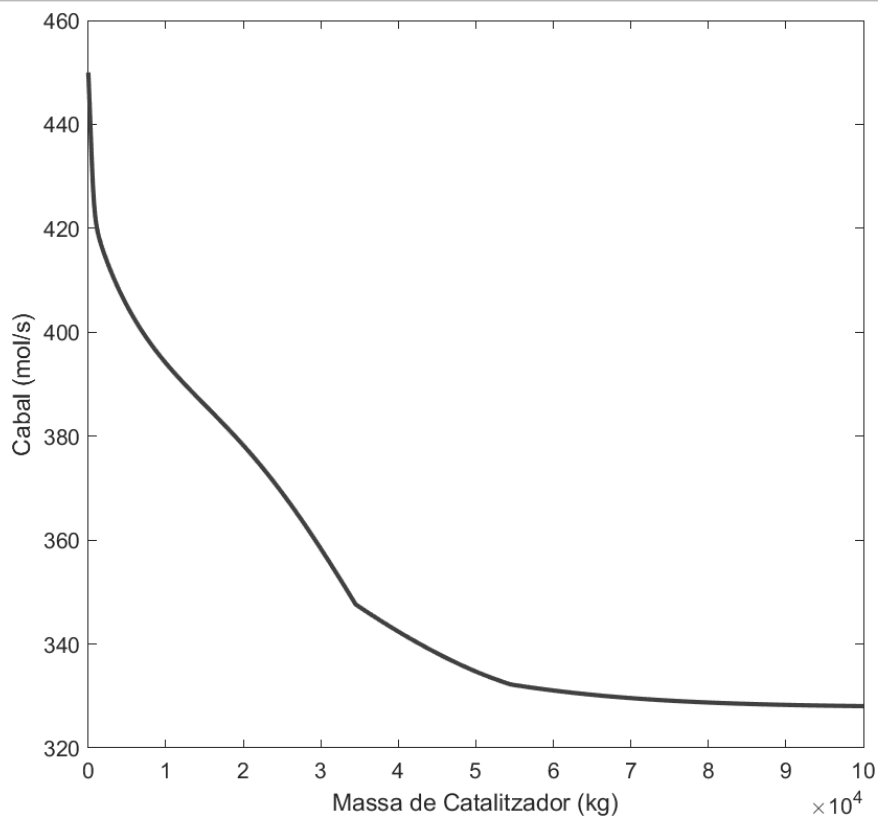


Figura A.57. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor PBR per la simulació amb 450 mol/s d'hidrogen d'alimentació al reactor.

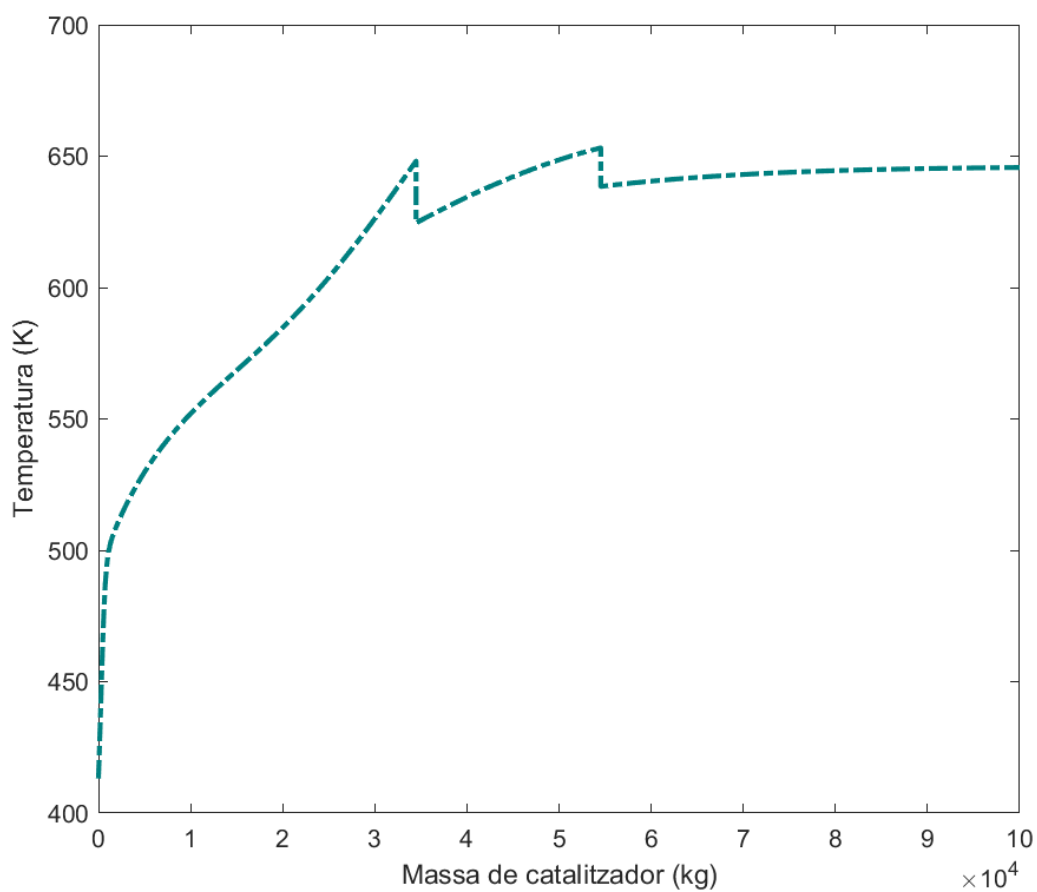


Figura A.58. Temperatura al llarg del reactor PBR per la simulació amb 450 mol/s d'hidrogen d'alimentació al reactor.

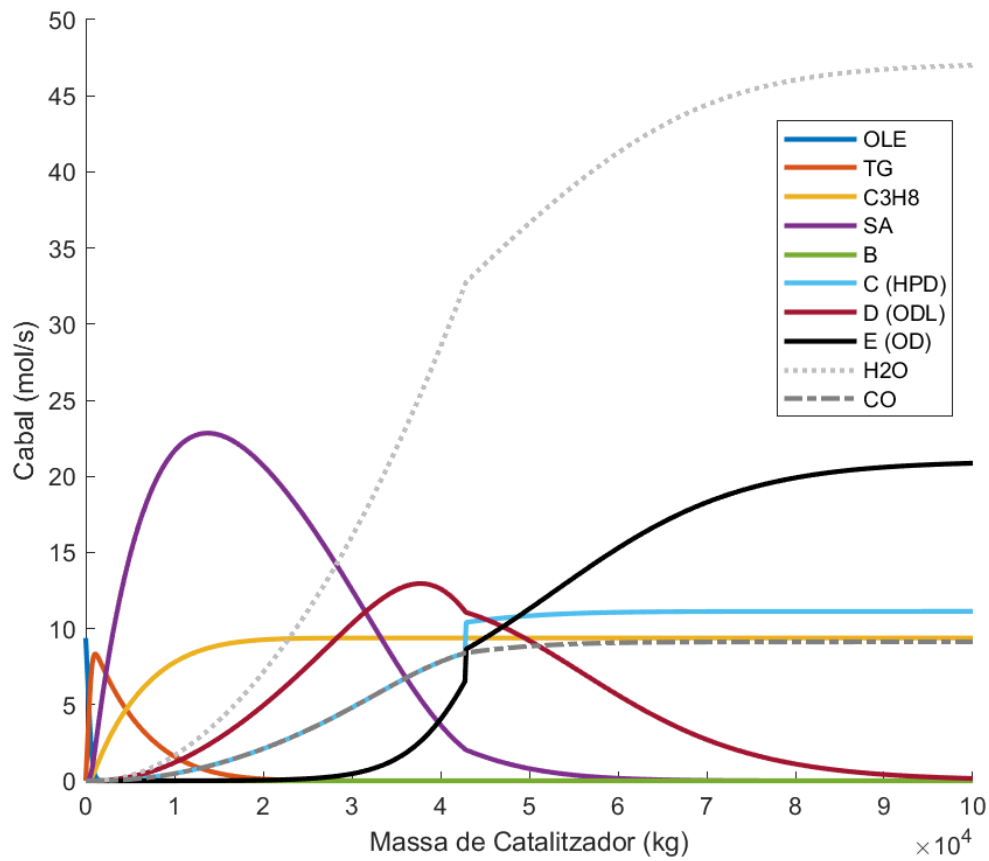


Figura A.59. Cabals de tots els compostos (excepte H₂) al llarg del reactor PBR per la simulació amb 500 mol/s d'hidrogen d'alimentació al reactor.

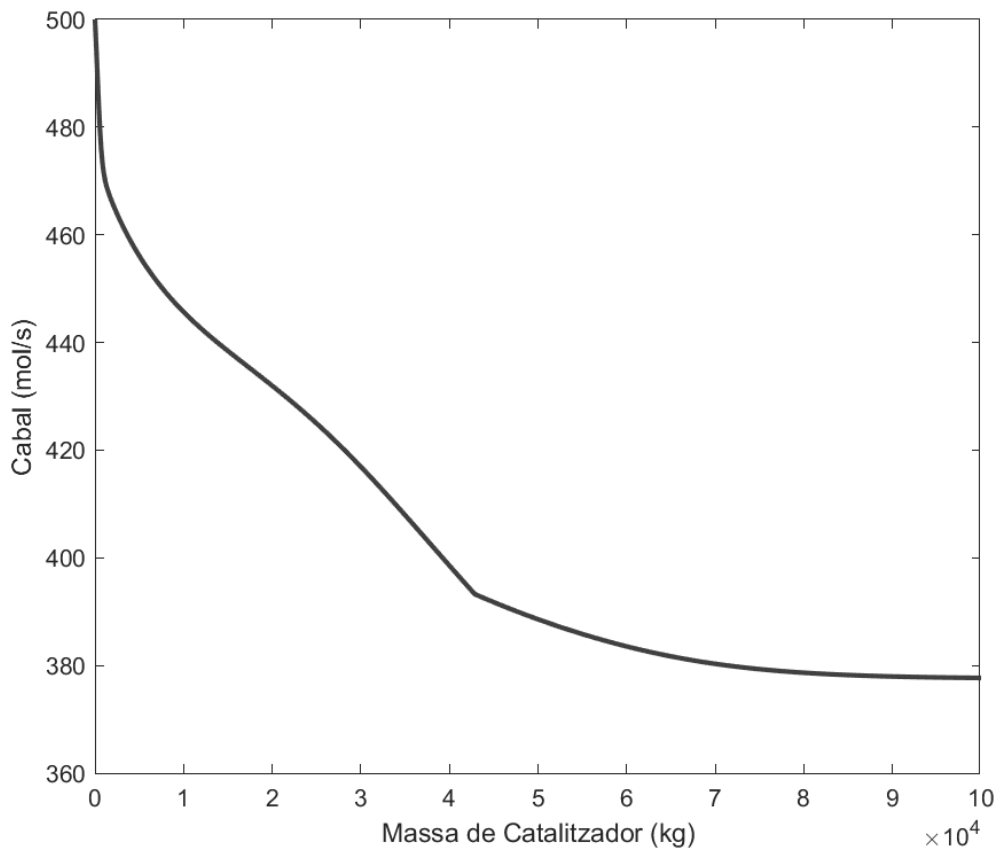


Figura A.60. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor PBR per la simulació amb 500 mol/s d'hidrogen d'alimentació al reactor.

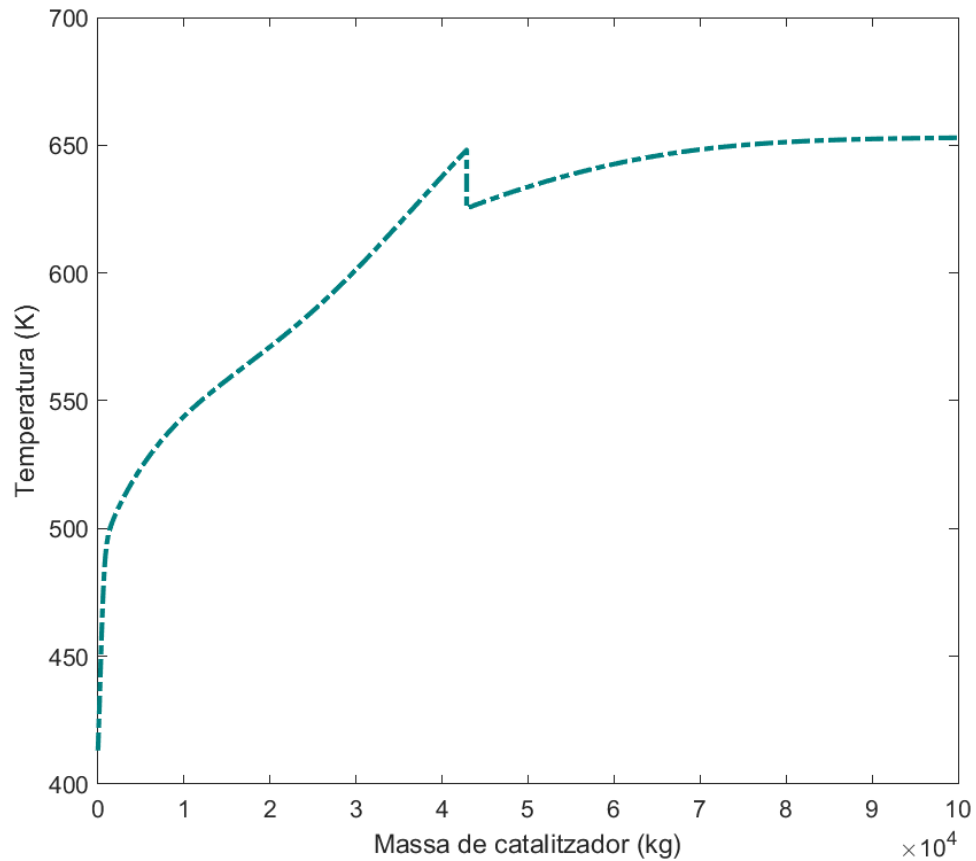


Figura A.61. Temperatura al llarg del reactor PBR per la simulació amb 500 mol/s d'hidrogen d'alimentació al reactor.

A partir dels resultats obtinguts, s'observa que injectar menys hidrogen a l'alimentació causa un augment de temperatura a l'interior del reactor PBR, arribant a la degradació dels lípids. Per tant, aquests experiments no són viables. Per altra banda, és possible injectar més hidrogen a l'alimentació però la producció es veu lleugerament afectada. Tanmateix, s'observa que, injectant 500 mol/s d'hidrogen amb aquestes condicions d'operació, es pot portar a terme amb una sola injecció de *quench*. Malgrat això, és preferible disposar de dues entrades de *quench* per motius d'adaptació a altres tipus d'operatives en un futur. D'aquesta manera, no hi ha una dependència directa del cabal d'hidrogen a l'entrada del reactor. Per tant, injectar 400 mol/s d'hidrogen a l'alimentació del reactor PBR és el més adient.

A.6 Resum de les condicions d'operació i perfils de la simulació de MATLAB®

En aquest apartat es mostra un resum final amb les condicions d'operació i perfils observats al reactor d'hidrotractament. A la Taula A.15 es mostren les condicions d'operació del reactor i cabals molars inicials. A la Taula A.16 es mostra la condició d'injecció dels diferents *quench*.

Taula A.15. Condicions d'operació inicials per la simulació del reactor amb injecció de *quench*.

Temperatura d'entrada (K)	Pressió (bar)	Cabal inicial d'olefines (mol/s)	Cabal inicial d'hidrogen (mol/s)
413.15	70	9.38	400

Taula A.16. Condicions d'injecció dels *quench* per la simulació del reactor PBR.

Nº <i>quench</i>	Cabal de <i>quench</i> (mol/s)	Temperatura del <i>quench</i>	Temperatura màxima del reactor (K)	Secció del reactor (ton. cat.)
1	1.34 mol/s C + 2.66 mol/s E	323.15	648.15	27.8
2	0.84 mol/s C + 1.66 mol/s E	323.15	653.15	40.7

Tanmateix, es mostren els cabals i la temperatura al llarg del reactor a les següents figures: Figura A.62, Figura A.63, Figura A.64.

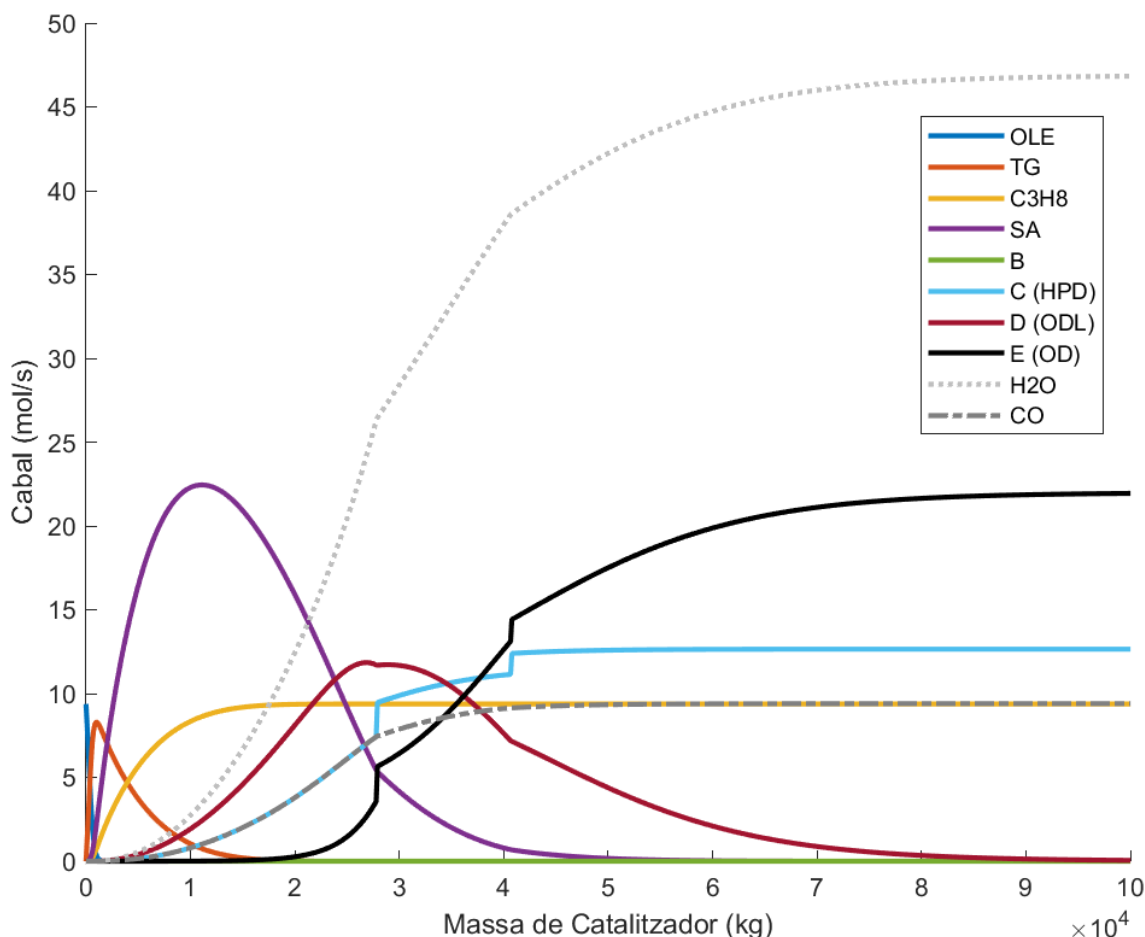


Figura A.62. Cabals dels compostos (excepte H₂) al llarg del reactor d'hidrotractament.

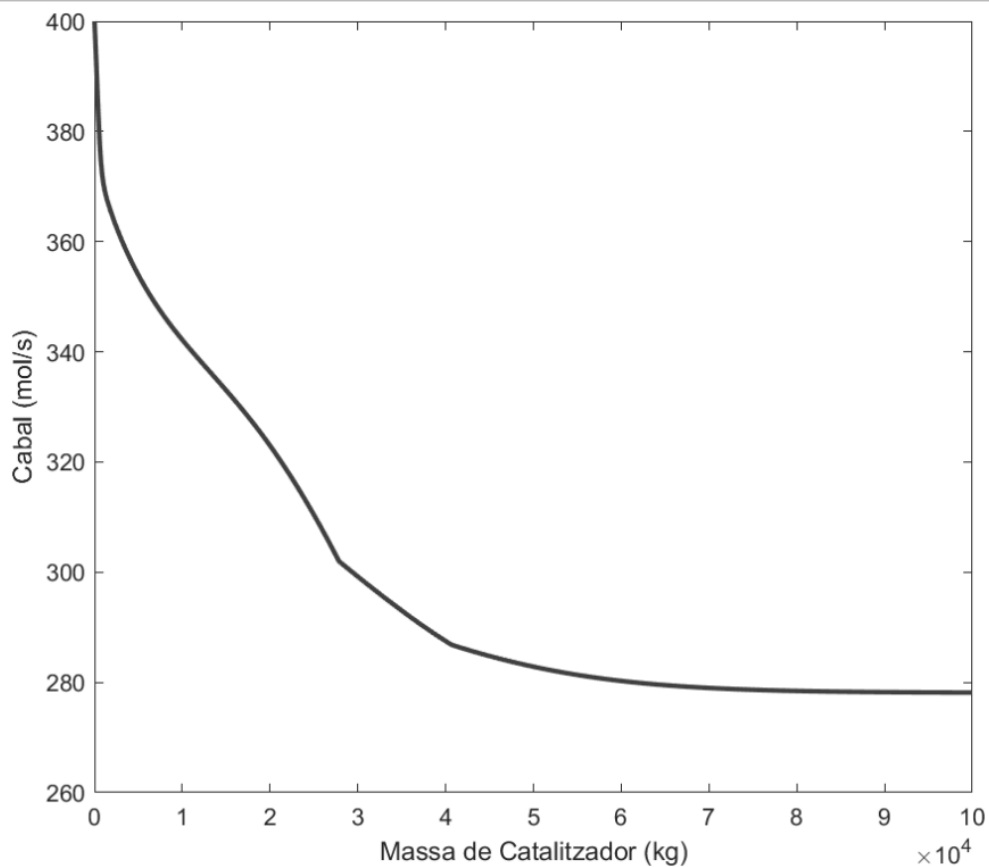


Figura A.63. Cabal d'hidrogen al llarg del reactor d'hidrotractament.

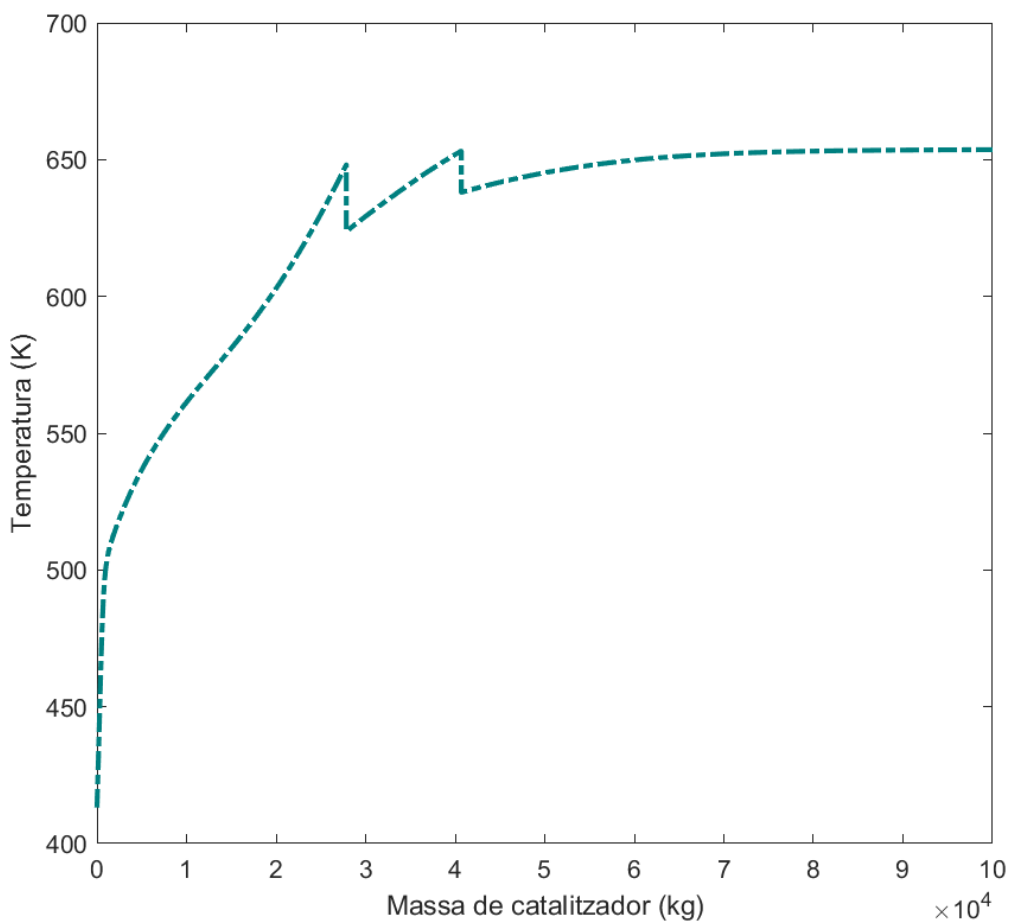


Figura A.64. Temperatura al llarg del reactor d'hidrotractament.

A.7 Codis de la simulació del reactor del software MATLAB®**A.7.1 Validació del model – reactor *batch***

```
%% VALIDACIÓ DEL MODEL - REACTOR BATCH
```

```
clc;
```

```
clear all;
```

```
% Paràmetres inicials
```

```
k1 = 37.3E-12; % Constant de velocitat k1
```

```
k2 = 29.17; % Constant de velocitat k2
```

```
k3 = 10E-6; % Constant de velocitat k3
```

```
k4 = 9.17E-5; % Constant de velocitat k4
```

```
K_eq = 905.6; % Constant d'equilibri
```

```
p0_H2 = 3E+6; % Pressió parcial de H2 (Pa)
```

```
R = 8.314; % Constant de gasos (J/mol·K)
```

```
T = 613; % Temperatura (K)
```

```
% Condicions inicials
```

```
C_A0 = 0.0625; % Concentració inicial de A (àcid gras - Àcid palmític)
```

```
C_B0 = 0; % Concentració inicial de B (aldehid - Hexadecanal)
```

```
C_C0 = 0; % Concentració inicial de C (alcanos - Pentadecà)
```

```
C_D0 = 0.015; % Concentració inicial de D (alcohol - Hexadecanol)
```

```
C_E0 = 0; % Concentració inicial de E (olefines/alcans - Hexadecà)
```

```
% Temps de simulació
```

```
t_span = [0 50000]; % segons
```

```
C0 = [C_A0; C_B0; C_C0; C_D0; C_E0]; % Condicions inicials
```

```
% Resolució numèrica del sistema amb ode45
```

```
[t, C] = ode45(@(t, C) reaction_system(C, k1, k2, k3, k4, K_eq, p0_H2), t_span, C0);
```

```
% Convertir el temps a minuts
```

```
t_minutes = t / 60;
```

```
% Traça dels perfils de concentració amb línies més gruixudes
```

```
figure;
```

```
plot(t_minutes, C(:,1), 'DisplayName', 'C_A (PA)', 'LineWidth', 2); % Ajusta el grosor de la línia
```

```
hold on;
```

```
plot(t_minutes, C(:,2), 'DisplayName', 'C_B (Aldehid)', 'LineWidth', 2); % Ajusta el grosor de la línia
```

```
plot(t_minutes, C(:,3), 'DisplayName', 'C_C (PD)', 'LineWidth', 2); % Ajusta el grosor de la línia
```

```

plot(t_minutes, C(:,4), 'DisplayName', 'C_D (HDL)', 'LineWidth', 2); % Ajusta el grosor de la
línia
plot(t_minutes, C(:,5), 'DisplayName', 'C_E (HXD)', 'LineWidth', 2); % Ajusta el grosor de la
línia
xlim([0 833.33])
ylim([0 0.07])
xlabel('Temps (minuts)');
ylabel('Concentració');
legend show;
title('Perfils de Concentració per Hidrodeoxigenació de Triglicèrids amb pH2');
% Funció que defineix el sistema d'equacions diferencials
function dCdt = reaction_system(C, k1, k2, k3, k4, K_eq, p0_H2)
    dCdt = zeros(5,1); % Vector de derivades
    % Se suposa pH2 igual a l'inicial
    pH2 = p0_H2;
    % Equacions diferencials amb dependència de pH2
    dCdt(1) = -k1 * C(1) * pH2; % A -> B
    dCdt(2) = k1 * C(1) * pH2 - k2 * C(2) - k3 * C(2) * pH2 + (k3 / K_eq) * C(4); % B -> C i B
-> D
    dCdt(3) = k2 * C(2); % B -> C
    dCdt(4) = k3 * C(2) * pH2 - (k3 / K_eq) * C(4) - k4 * C(4); % B -> D i D -> E
    dCdt(5) = k4 * C(4); % D -> E
end

```

A.7.2 Reactor PBR isotèrmic

clc;

clear all;

% CONDICIONS INICIALS

% =====

FOLE_0 = 9.38; % Cabal molar inicial d'olefines (mol/s)

F_TG0 = 0; % Cabal molar inicial triglicèrid (mol/s)

F_C3H80 = 0; % Cabal molar inicial propà (mol/s)

FA0 = 0; % Cabal molar inicial de A (mol/s)

FB0 = 0; % Cabal molar inicial de B (mol/s)

FC0 = 0; % Cabal molar inicial de C (mol/s)

FD0 = 0; % Cabal molar inicial de D (mol/s)

FE0 = 0; % Cabal molar inicial de E (mol/s)

FH2_0 = 200; % Cabal molar inicial de H2 (mol/s)

FH2O0 = 0; % Cabal molar inicial de H2O (mol/s)

FCO0 = 0; % Cabal molar inicial de CO (mol/s)

P_total = 7E+6; % Presión total (Pa)

FT0 = FOLE_0 + F_TG0 + F_C3H80 + FA0 + FB0 + FC0 + FD0 + FE0 + FH2_0 + FH2O0 + FCO0; % Flujo total inicial (mol/s)

% CONFIGURACIÓ DEL MÈTODE RK4

% =====

h = 0.1; % Pas d'integració

W0 = 0; % Massa de catalitzador inicial

Wf = 100000; % Massa de catalitzador final

W = W0:h:Wf;

% Vector inicial de fluxos

F0 = [FOLE_0; F_TG0; F_C3H80; FA0; FB0; FC0; FD0; FE0; FH2_0; FH2O0; FCO0];

F = zeros(length(F0), length(W));

F(:, 1) = F0;

% Integració numèrica amb RK4

for i = 1:length(W) - 1

Wi = W(i);

Fi = F(:, i);

k1 = f(Wi, Fi, P_total);

k2 = f(Wi + h/2, Fi + (h/2) * k1, P_total);

```

k3 = f(Wi + h/2, Fi + (h/2) * k2, P_total);
k4 = f(Wi + h, Fi + h * k3, P_total);
F(:, i + 1) = Fi + (h/6) * (k1 + 2*k2 + 2*k3 + k4);
% Assegurar que cap flux sigui negatiu
F(F(:, i+1) < 0, i+1) = 0;
end
% REPRESENTACIÓ GRÀFICA
% =====
figure;
hold on;
plot(W, F(1, :), 'DisplayName', 'OLE', 'LineWidth', 2, 'Color', [0 0.4470 0.7410]);
plot(W, F(2, :), 'DisplayName', 'TG', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.8500 0.3250 0.0980]);
plot(W, F(3, :), 'DisplayName', 'C3H8', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.9290 0.6940 0.1250]);
plot(W, F(4, :), 'DisplayName', 'SA', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.4940 0.1840 0.5560]);
plot(W, F(5, :), 'DisplayName', 'B', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.4660 0.6740 0.1880]);
plot(W, F(6, :), 'DisplayName', 'C (HPD)', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.3010 0.7450 0.9330]);
plot(W, F(7, :), 'DisplayName', 'D (ODL)', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.6350 0.0780 0.1840]);
plot(W, F(8, :), 'DisplayName', 'E (OD)', 'LineWidth', 2, 'Color', [0 0 0]);
plot(W, F(10, :), '!', 'DisplayName', 'H2O', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.75 0.75 0.75]);
plot(W, F(11, :), '-.', 'DisplayName', 'CO', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.5 0.5 0.5]);
hold off;
xlabel('Massa de Catalitzador (kg)');
ylabel('Flux (mol/s)');
title('Fluxos de Components en un Reactor PBR');
legend;
figure(2);
plot(W, F(9, :), 'DisplayName', 'H2', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.25 0.25 0.25]);
xlabel('Massa de Catalitzador (kg)');
ylabel('Cabal (mol/s)');
title('Cabal molar H2 al llarg del PBR');
% MOSTRAR VALORS FINALS
% =====
variables = {'OLE', 'TG', 'C3H8', 'SA', 'B', 'C(HPD)', 'D(ODL)', ...
            'E(OD)', 'H2', 'H2O', 'CO'};
fprintf('Valors finals:\n');

```

```

for i = 1:length(variables)
    fprintf('%s: %.4f mol/s\n', variables{i}, F(i, end));
end
% FUNCIO DE DERIVADES (RK4)
% =====
function dFdW = f(Wi, F, P_total)
    % PARÀMETRES CINÈTICS
    % =====
    R = 8.314;    % Constant de gasos (J/mol·K)
    T = 633;    % Temperatura (K)
    G = -34700;  % Energia lliure de Gibbs
    A_OLE = 1e-5; Ea_OLE = 30000;
    k_OLE = A_OLE * exp(-Ea_OLE / (R * T));
    A_TG = 5e-5; Ea_TG = 50000;
    k_TG = A_TG * exp(-Ea_TG / (R * T)) * 10;
    A1 = 1.92e-4; Ea1 = 79900;
    k1 = A1 * exp(-Ea1 / (R * T)) * 50;
    A2 = 1.67e9; Ea2 = 90700;
    k2 = A2 * exp(-Ea2 / (R * T)) * 10;
    A3 = 1.61e2; Ea3 = 84800;
    k3 = A3 * exp(-Ea3 / (R * T)) * 10;
    A4 = 3.62e8; Ea4 = 152700;
    k4 = A4 * exp(-Ea4 / (R * T)) * 10;
    K_eq = exp(G / (-R * T));
    % DEFINICIÓ DE VARIABLES
    % SEPARACIÓ DE FASES
    F_liquid = F([1 2 4 5 6 7 8]);    % OLE, TG, A, B, D, E, Heptadecà (líquid)
    FT_liquid = sum(F_liquid);
    F_gas = F([3 9 10 11]);    % C3H8, H2, H2O, CO (gasos)
    FT_gas = sum(F_gas);
    % FRACCIONS MOLARS PER FASE
    x_OLE = F(1) / FT_liquid;    % Olefines (líquid)
    x_TG = F(2) / FT_liquid;    % Triglicèrids (líquid)
    x_A = F(4) / FT_liquid;    % Àcid esteàric (líquid)
    x_B = F(5) / FT_liquid;    % Octadecanal (líquid)

```

```

x_D = F(7) / FT_liquid;          % Octadecanol (líquid)
y_H2 = F(9) / FT_gas;           % Hidrogen (gas)
p_H2 = y_H2 * P_total;         % Pressió parcial d'H2
% EQUACIONS DE VELOCITAT
% =====
r0 = k_OLE * x_OLE * p_H2;      % OLE (liq) + 3H2 (gas) → TG
rTG = k_TG * x_TG * p_H2;      % TG (liq) + 3H2 (gas) → 3A + C3H8
r1 = k1 * x_A * p_H2;          % A (liq) + H2 (gas) → B + H2O
r2 = k2 * x_B;                 % B (liq) → C + CO
r3 = k3 * x_B * p_H2 - (k3 / K_eq) * x_D; % B + H2 ⇌ D (liq)
r4 = k4 * x_D;                 % D (liq) + H2 → E + H2O
% EQUACIONS DIFERENCIALS
% =====
dFdw = zeros(11, 1);
dFdw(1) = -r0;                 % Trioleïna
dFdw(2) = r0 - rTG;           % Tristearina
dFdw(3) = rTG;                % Propà
dFdw(4) = 3*rTG - r1;        % Àcid esteàric
dFdw(5) = r1 - r2 - r3;      % Octadecanal
dFdw(6) = r2;                 % Heptadecà
dFdw(7) = r3 - r4;           % Octadecanol
dFdw(8) = r4;                 % Octadecà
dFdw(9) = - (3*r0 + 3*rTG + r1 + r3 + r4); % Hidrogen
dFdw(10) = r1 + r4;          % Aigua
dFdw(11) = r2;               % Monòxid de carboni
end

```

A.7.3 Reactor PBR no-isotèrmic

```
clc;
```

```
clear;
```

```
%% CONDICIONS INICIALS
```

```
FOLE_0 = 9.38; % Cabal molar inicial d'olefines (mol/s)
```

```
FTG_0 = 0; % Cabal molar inicial triglicèrid (mol/s)
```

```
FC3H8_0 = 0; % Cabal molar inicial propà (mol/s)
```

```
FA_0 = 0; % Cabal molar inicial de A (mol/s)
```

```
FB_0 = 0; % Cabal molar inicial de B (mol/s)
```

```
FC_0 = 0; % Cabal molar inicial de C (mol/s)
```

```
FD_0 = 0; % Cabal molar inicial de D (mol/s)
```

```
FE_0 = 0; % Cabal molar inicial de E (mol/s)
```

```
FH2_0 = 120; % Cabal molar inicial de H2 (mol/s)
```

```
FH2O_0 = 0; % Cabal molar inicial de H2O (mol/s)
```

```
FCO_0 = 0; % Cabal molar inicial de CO (mol/s)
```

```
T0 = 273.15 + 100; % Temperatura d'entrada de l'alimentació (K)
```

```
P_total = 7E+6; % Pressió total (Pa)
```

```
FT0 = FOLE_0 + FTG_0 + FC3H8_0 + FA_0 + FB_0 + FC_0 + FD_0 + FE_0 + FH2_0 +  
FH2O_0 + FCO_0; % Cabal molar total inicial (mol/s)
```

```
%% CONFIGURACIÓ DEL MÈTODE RK4
```

```
h = 0.001; % Pas d'integració
```

```
W0 = 0; % Massa de catalitzador inicial
```

```
Wf = 50000; % Massa de catalitzador final
```

```
W = W0:h:Wf;
```

```
% Vector inicial de fluxos
```

```
F0 = [FOLE_0; FTG_0; FC3H8_0; FA_0; FB_0; FC_0; FD_0; FE_0; FH2_0; FH2O_0;  
FCO_0; T0];
```

```
F = zeros(length(F0), length(W));
```

```
F(:, 1) = F0;
```

```
% Integració numèrica amb RK4
```

```
for i = 1:length(W) - 1
```

```
    Wi = W(i);
```

```
    Fi = F(:, i);
```

```
    k1 = f(Wi, Fi, P_total);
```

```
    k2 = f(Wi + h/2, Fi + (h/2) * k1, P_total);
```

```
    k3 = f(Wi + h/2, Fi + (h/2) * k2, P_total);
```

```

k4 = f(Wi + h, Fi + h * k3, P_total);
F(:, i + 1) = Fi + (h/6) * (k1 + 2*k2 + 2*k3 + k4);
F(F(:, i+1) < 0, i+1) = 0; % Assegurar que cap flux sigui negatiu
end
%% REPRESENTACIÓ GRÀFICA
figure(1);
hold on;
plot(W, F(1, :), 'DisplayName', 'OLE', 'LineWidth', 2, 'Color', [0 0.4470 0.7410]);
plot(W, F(2, :), 'DisplayName', 'TG', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.8500 0.3250 0.0980]);
plot(W, F(3, :), 'DisplayName', 'C3H8', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.9290 0.6940 0.1250]);
plot(W, F(4, :), 'DisplayName', 'SA', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.4940 0.1840 0.5560]);
plot(W, F(5, :), 'DisplayName', 'B', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.4660 0.6740 0.1880]);
plot(W, F(6, :), 'DisplayName', 'C (HPD)', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.3010 0.7450 0.9330]);
plot(W, F(7, :), 'DisplayName', 'D (ODL)', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.6350 0.0780 0.1840]);
plot(W, F(8, :), 'DisplayName', 'E (OD)', 'LineWidth', 2, 'Color', [0 0 0]);
plot(W, F(10, :), '!', 'DisplayName', 'H2O', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.75 0.75 0.75]);
plot(W, F(11, :), '-.', 'DisplayName', 'CO', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.5 0.5 0.5]);
hold off;
xlabel('Massa de Catalitzador (kg)');
ylabel('Cabal (mol/s)');
title('Cabals molars al llarg del PBR');
legend;
figure(2);
plot(W, F(9, :), 'DisplayName', 'H2', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.25 0.25 0.25]);
xlabel('Massa de Catalitzador (kg)');
ylabel('Cabal (mol/s)');
title('Cabal molar H2 al llarg del PBR');
figure(3);
plot(W, F(12, :), '-.', 'DisplayName', 'T', 'LineWidth', 2, 'Color', [0 0.5 0.5]);
xlabel('Massa de catalitzador (kg)');
ylabel('Temperatura (K)');
title('Perfil de temperatura del PBR');
%% MOSTRAR VALORS FINALS
variables = {'OLE', 'TG', 'C3H8', 'SA', 'B', 'C(HPD)', 'D(ODL)', ...
            'E(OD)', 'H2', 'H2O', 'CO'};

```

```

fprintf('Valors finals:\n');
for i = 1:length(variables)
    fprintf('%s: %.4f mol/s\n', variables{i}, F(i, end));
end
%% FUNCIÓ DE DERIVADES (RK4)
function dFdW = f(~, F, P_total)
    % PARÀMETRES CINÈTICS
    R = 8.314;    % Constant de gasos (J/mol·K)
    G = -34700;  % Energia lliure de Gibbs
    A_OLE = 1e-5; Ea_OLE = 30000;
    k_OLE = A_OLE * exp(-Ea_OLE / (R * F(12))) * 1;
    A_TG = 5e-5; Ea_TG = 50000;
    k_TG = A_TG * exp(-Ea_TG / (R * F(12))) * 10;
    A1 = 1.92e-4; Ea1 = 79900;
    k1 = A1 * exp(-Ea1 / (R * F(12))) * 50;
    A2 = 1.67e9; Ea2 = 90700;
    k2 = A2 * exp(-Ea2 / (R * F(12))) * 10;
    A3 = 1.61e2; Ea3 = 84800;
    k3 = A3 * exp(-Ea3 / (R * F(12))) * 10;
    A4 = 3.62e8; Ea4 = 152700;
    k4 = A4 * exp(-Ea4 / (R * F(12))) * 10;
    K_eq = exp(G / (-R * F(12)));
    % DEFINICIÓ DE VARIABLES
    % SEPARACIÓ DE FASES
    F_liquid = F([1 2 4 5 6 7 8]);    % OLE, TG, A, B, D, E, Heptadecà (líquid)
    FT_liquid = sum(F_liquid);
    F_gas = F([3 9 10 11]);          % C3H8, H2, H2O, CO (gasos)
    FT_gas = sum(F_gas);
    % FRACCIONS MOLARS PER FASE
    x_OLE = F(1) / FT_liquid;        % Olefines (líquid)
    x_TG = F(2) / FT_liquid;        % Triglicèrids (líquid)
    x_A = F(4) / FT_liquid;         % Àcid esteàric (líquid)
    x_B = F(5) / FT_liquid;         % Octadecanal (líquid)
    x_D = F(7) / FT_liquid;         % Octadecanol (líquid)
    y_H2 = F(9) / FT_gas;           % Hidrogen (gas)

```

```

p_H2 = y_H2 * P_total;           % Pressió parcial d'H2
% EQUACIONS DE VELOCITAT (amb fases separades)
r0 = k_OLE * x_OLE * p_H2;       % OLE (liq) + 3H2 (gas) → TG
rTG = k_TG * x_TG * p_H2;       % TG (liq) + 3H2 (gas) → 3A + C3H8
r1 = k1 * x_A * p_H2;           % A (liq) + H2 (gas) → B + H2O
r2 = k2 * x_B;                  % B (liq) → C + CO
r3 = k3 * x_B * p_H2 - (k3 / K_eq) * x_D; % B + H2 ⇌ D (liq)
r4 = k4 * x_D;                  % D (liq) + H2 → E + H2O
% PROPIETATS DELS COMPOSTOS I REACCIONS
Cp = [2940; 3040; 136.69; 910; 910; 830; 890; 860; 29.7916; 36.97565; 375.42614]; % J/mol·K
Hr = [-366000; -237000; -79000; -59000; -59000; -79000]; % J/mol
Q_reac = Hr(1)*r0 + Hr(2)*rTG + Hr(3)*r1 + Hr(4)*r2 + Hr(5)*r3 + Hr(6)*r4; % J/s
Cp_total = sum(F(1:11).*Cp); % J/K·s
dTdW = -(Q_reac/Cp_total); % Increment de temperatura al llarg del PBR
% EQUACIONS DIFERENCIALS
dFdW = zeros(12, 1);
dFdW(1) = -r0;                  % Trioleïna
dFdW(2) = r0 - rTG;            % Tristearina
dFdW(3) = rTG;                 % Propà
dFdW(4) = 3*rTG - r1;         % Àcid esteàric
dFdW(5) = r1 - r2 - r3;       % Octadecanal
dFdW(6) = r2;                  % Heptadecà
dFdW(7) = r3 - r4;            % Octadecanol
dFdW(8) = r4;                  % Octadecà
dFdW(9) = -(3*r0 + 3*rTG + r1 + r3 + r4); % Hidrogen
dFdW(10) = r1 + r4;           % Aigua
dFdW(11) = r2;                % Monòxid de carboni
dFdW(12) = dTdW;              % Balanç d'energia
end

```

A.7.4 Reactor PBR no-isotèrmic amb estratègies de control de temperatura

clc;

clear;

%% CONDICIONS INICIALS

FOLE_0 = 9.38; % Cabal molar inicial d'olefines (mol/s)

FTG_0 = 0; % Cabal molar inicial triglicèrid (mol/s)

FC3H8_0 = 0; % Cabal molar inicial propà (mol/s)

FA_0 = 0; % Cabal molar inicial de A (mol/s)

FB_0 = 0; % Cabal molar inicial de B (mol/s)

FC_0 = 0; % Cabal molar inicial de C (mol/s)

FD_0 = 0; % Cabal molar inicial de D (mol/s)

FE_0 = 0; % Cabal molar inicial de E (mol/s)

FH2_0 = 400; % Cabal molar inicial de H2 (mol/s)

FH2O_0 = 0; % Cabal molar inicial de H2O (mol/s)

FCO_0 = 0; % Cabal molar inicial de CO (mol/s)

T0 = 273.15 + 140; % Temperatura d'entrada de l'alimentació (K)

P_total = 7E+6; % Pressió total (Pa)

FT0 = FOLE_0 + FTG_0 + FC3H8_0 + FA_0 + FB_0 + FC_0 + FD_0 + FE_0 + FH2_0 + FH2O_0 + FCO_0; % Cabal molar total inicial (mol/s)

%% CONFIGURACIÓ DEL MÈTODE RK4

h = 0.01; % Pas d'integració

W0 = 0; % Massa de catalitzador inicial

Wf = 100000; % Massa de catalitzador final

W = W0:h:Wf;

% Vector inicial de fluxos

F0 = [FOLE_0; FTG_0; FC3H8_0; FA_0; FB_0; FC_0; FD_0; FE_0; FH2_0; FH2O_0; FCO_0; T0];

F = zeros(length(F0), length(W));

F(:, 1) = F0;

% Configuració del quench

F_quench_vector = [4, 2.5]; % Cabal de quench afegit (mescla de C + E)

T_quench_vector = [648.15, 653.15]; % Temperatures màximes

quench_done = false(size(T_quench_vector)); % Passar a la següent posició del vector

T_quench = 323.15; % Temperatura de mescla C + E fred (K)

Cp_quench = (850+880)/2; % Cp de mescla C + E J/mol·K

assert(length(T_quench_vector) == length(F_quench_vector));

```

% Integració numèrica amb RK4
for i = 1:length(W) - 1
    Wi = W(i);
    Fi = F(:, i);
    T_actual = Fi(12);
    % Comprovar si s'ha arribat a alguna temperatura objectiu per primera vegada
    for j = 1:length(T_quench_vector)
        if T_actual >= T_quench_vector(j) && ~quench_done(j)
            F_quench = F_quench_vector(j);
            Fi(6) = Fi(6) + F_quench*0.335;
            Fi(8) = Fi(8) + F_quench*0.665;
            % Calcular nova temperatura
            Cp_total = sum(Fi(1:11) .* [2940; 3040; 136.69; 930; 930; 850; 910; 880; 29.7916;
36.97565; 375.42614]);
            entalpia_total = Cp_total * T_actual + F_quench * Cp_quench * T_quench;
            Fi(12) = entalpia_total / (Cp_total + F_quench * Cp_quench);
            % Marcar quench com a fet
            quench_done(j) = true;
        end
    end
    k1 = f(Wi, Fi, P_total);
    k2 = f(Wi + h/2, Fi + (h/2) * k1, P_total);
    k3 = f(Wi + h/2, Fi + (h/2) * k2, P_total);
    k4 = f(Wi + h, Fi + h * k3, P_total);
    F(:, i + 1) = Fi + (h/6) * (k1 + 2*k2 + 2*k3 + k4);
    F(F(:, i+1) < 0, i+1) = 0; % Assegurar que cap flux sigui negatiu
end

%% REPRESENTACIÓ GRÀFICA
figure(1);
hold on;
plot(W, F(1, :), 'DisplayName', 'OLE', 'LineWidth', 2, 'Color', [0 0.4470 0.7410]);
plot(W, F(2, :), 'DisplayName', 'TG', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.8500 0.3250 0.0980]);
plot(W, F(3, :), 'DisplayName', 'C3H8', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.9290 0.6940 0.1250]);
plot(W, F(4, :), 'DisplayName', 'SA', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.4940 0.1840 0.5560]);
plot(W, F(5, :), 'DisplayName', 'B', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.4660 0.6740 0.1880]);

```

```

plot(W, F(6, :), 'DisplayName', 'C (HPD)', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.3010 0.7450 0.9330]);
plot(W, F(7, :), 'DisplayName', 'D (ODL)', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.6350 0.0780 0.1840]);
plot(W, F(8, :), 'DisplayName', 'E (OD)', 'LineWidth', 2, 'Color', [0 0 0]);
plot(W, F(10, :), '-', 'DisplayName', 'H2O', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.75 0.75 0.75]);
plot(W, F(11, :), '-.', 'DisplayName', 'CO', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.5 0.5 0.5]);
hold off;
xlabel('Massa de Catalitzador (kg)');
ylabel('Cabal (mol/s)');
title('Cabals molars al llarg del PBR');
legend;
figure(2);
plot(W, F(9, :), 'DisplayName', 'H2', 'LineWidth', 2, 'Color', [0.25 0.25 0.25]);
xlabel('Massa de Catalitzador (kg)');
ylabel('Cabal (mol/s)');
title('Cabal molar H2 al llarg del PBR');
figure(3);
plot(W, F(12, :), '-.', 'DisplayName', 'T', 'LineWidth', 2, 'Color', [0 0.5 0.5]);
xlabel('Massa de catalitzador (kg)');
ylabel('Temperatura (K)');
title('Perfil de temperatura del PBR');
%% MOSTRAR VALORS FINALS
variables = {'OLE', 'TG', 'C3H8', 'SA', 'B', 'C(HPD)', 'D(ODL)', ...
            'E(OD)', 'H2', 'H2O', 'CO'};
fprintf('-----Valors finals:-----\n');
for i = 1:length(variables)
    fprintf('%s: %.4f mol/s\n', variables{i}, F(i, end));
end
% Temperatura final i màxima
T_final = F(12, end);
T_max = max(F(12, :));
fprintf('\nTemperatura final: %.2f K (%.2f °C)\n', T_final, T_final - 273.15);
fprintf('Temperatura màxima: %.2f K (%.2f °C)\n', T_max, T_max - 273.15);
%% FUNCIO DE DERIVADES (RK4)
function dFdW = f(~, F, P_total)
    % PARÀMETRES CINÈTICS

```

```

R = 8.314;    % Constant de gasos (J/mol·K)
G = -34700;  % Energia lliure de Gibbs
A_OLE = 1e-5; Ea_OLE = 30000;
k_OLE = A_OLE * exp(-Ea_OLE / (R * F(12)));
A_TG = 5e-5; Ea_TG = 50000;
k_TG = A_TG * exp(-Ea_TG / (R * F(12)));
A1 = 1.92e-4; Ea1 = 79900;
k1 = A1 * exp(-Ea1 / (R * F(12))) * 15;
A2 = 1.67e9; Ea2 = 90700;
k2 = A2 * exp(-Ea2 / (R * F(12))) * 10;
A3 = 1.61e2; Ea3 = 84800;
k3 = A3 * exp(-Ea3 / (R * F(12))) * 10;
A4 = 3.62e8; Ea4 = 152700;
k4 = A4 * exp(-Ea4 / (R * F(12))) * 15;
K_eq = exp(G / (-R * F(12)));
% DEFINICIÓ DE VARIABLES
% SEPARACIÓ DE FASES
F_liquid = F([1 2 4 5 6 7 8]);    % OLE, TG, A, B, D, E, Heptadecà (líquid)
FT_liquid = sum(F_liquid);
F_gas = F([3 9 10 11]);          % C3H8, H2, H2O, CO (gasos)
FT_gas = sum(F_gas);
% FRACCIONS MOLARS PER FASE
x_OLE = F(1) / FT_liquid;        % Olefines (líquid)
x_TG = F(2) / FT_liquid;        % Triglicèrids (líquid)
x_A = F(4) / FT_liquid;        % Àcid esteàric (líquid)
x_B = F(5) / FT_liquid;        % Octadecanal (líquid)
x_D = F(7) / FT_liquid;        % Octadecanol (líquid)
y_H2 = F(9) / FT_gas;          % Hidrogen (gas)
p_H2 = y_H2 * P_total;         % Pressió parcial d'H2
% EQUACIONS DE VELOCITAT (amb fases separades)
r0 = k_OLE * x_OLE * p_H2;      % OLE (liq) + 3H2 (gas) → TG
rTG = k_TG * x_TG * p_H2;      % TG (liq) + 3H2 (gas) → 3A + C3H8
r1 = k1 * x_A * p_H2;          % A (liq) + H2 (gas) → B + H2O
r2 = k2 * x_B;                 % B (liq) → C + CO
r3 = k3 * x_B * p_H2 - (k3 / K_eq) * x_D;    % B + H2 ⇌ D (liq)

```

```

r4 = k4 * x_D; % D (liq) + H2 → E + H2O
% PROPIETATS DELS COMPOSTOS I REACCIONS
Cp = [2940; 3040; 136.69; 910; 910; 830; 890; 860; 29.7916; 36.97565; 375.42614]; %
J/mol·K
Hr = [-366000; -237000; -79000; -59000; -59000; -79000]; % J/mol
Q_reac = Hr(1)*r0 + Hr(2)*rTG + Hr(3)*r1 + Hr(4)*r2 + Hr(5)*r3 + Hr(6)*r4; % J/s
Cp_total = sum(F(1:11).*Cp); % J/K·s
dTdW = -(Q_reac/Cp_total); % Increment de temperatura al llarg del PBR
% EQUACIONS DIFERENCIALS
dFdW = zeros(12, 1);
dFdW(1) = -r0; % Trioleïna
dFdW(2) = r0 - rTG; % Tristearina
dFdW(3) = rTG; % Propà
dFdW(4) = 3*rTG - r1; % Àcid esteàric
dFdW(5) = r1 - r2 - r3; % Octadecanal
dFdW(6) = r2; % Heptadecà
dFdW(7) = r3 - r4; % Octadecanol
dFdW(8) = r4; % Octadecà
dFdW(9) = -(3*r0 + 3*rTG + r1 + r3 + r4); % Hidrogen
dFdW(10) = r1 + r4; % Aigua
dFdW(11) = r2; % Monòxid de carboni
dFdW(12) = dTdW; % Balanç d'energia
end

```

B. CÀLCUL DE LA GEOMETRIA DEL REACTOR

B.1 Pèrdua de càrrega

Les dimensions del reactor s'han calculat a partir del volum de catalitzador requerit, obtingut mitjançant la modelització matemàtica del sistema a MATLAB®. A partir d'aquest volum (100tn a una densitat aparent de 1tn/m³ són 100m³) i fixant una relació longitud/diàmetre (L/D), s'han calculat aquests dos últims. La relació L/D s'ha seleccionat tenint en compte la pèrdua de càrrega que s'ha obtingut en cada cas, s'han estudiat relacions L/D 2, 3 i 4. Al ser bifàsic, s'ha utilitzat la correlació de Larkins^[13] per considerar la interacció entre el flux líquid (oli) i el flux de gas (H₂). A continuació, s'expliquen els passos següents:

En primer lloc, amb les dades de la Taula B.1, s'ha aplicat l'equació d'Ergun (E-B.1) per estimar la pèrdua de càrrega de cada fase per separat. A condicions idèntiques, 70 bar i a la WABT (350°C aproximadament).

$$\frac{dP}{dz} = - \frac{G}{\rho \cdot g_c \cdot D_p} \cdot \left(\frac{1 - \Phi}{\Phi^3} \right) \cdot \left(\frac{150 \cdot (1 - \Phi) \cdot \mu}{D_p} + 1.75 \cdot G \right) \quad (\text{E-B.1})$$

Taula B.1. Variables i valors utilitzats pel càlcul. (S'han estimat algunes propietats físiques dels fluids a la temperatura d'operació propera als 350°C.)

Variables	Fase líquida	Fase gas
P: caiguda de pressió (Pa)	-	-
D _p : diàmetre partícula de catalitzador (m)	0.005	0.005
Φ: porositat	0.2	0.2
g _c : factor de conversió de valor 1 en sistema mètric	1	1
μ: viscositat del fluid a través del llit (kg/m·s)	0.0035	0.000015
ρ: densitat del fluid (kg/m ³)	700	2.67
G: velocitat massica superficial (kg/m ² ·s)	u(m/s) * ρ(kg/m ³)	
u: velocitat superficial (m/s)	Q(m ³ /s) / A(m ²)	
z: longitud al llarg del reactor (m)	-	-
Q: cabal volumètric (m ³ /s)	0.012	0.302

Resultant en la següent Taula B.2:

Taula B.2. Resultats de l'equació d'Ergun per cada fase i per cada relació L/D.

L/D	P _{Líquid} (Pa)	P _{Gas} (Pa)
2	12,887.97	1,820.82
3	22,223.18	3,357.81
4	32,735.65	5,230.69

Tot i que es treballa amb un reactor de grans dimensions, es pot observar que les pèrdues de càrrega obtingudes són relativament baixes, més si es compara amb la pressió d'operació de 70 bar. Això es pot atribuir principalment a una velocitat superficial del líquid baixa, ja que el cabal d'oli és relativament petit en relació a l'àrea transversal del reactor i això es tradueix en valors inferiors a 0.002 m/s, reduint la fricció dins el llit de partícules. També pot ser degut a la influència de la viscositat, una variable que té un pes important a l'equació d'Ergun i que pot variar notablement en funció de la temperatura considerada.

És important mencionar que els càlculs s'han simplificat, ja que només s'ha considerat un llit catalític continu, quan en realitat la configuració interna d'un reactor *Trickle-bed* és més complexa. No s'han tingut en compte elements interns com les safates de distribució, els suports del catalitzador, els llits d'inert ni canvis de composició i cabal volumètric (reaccions i entrades de *quench*). Tots aquests factors provocarien resistències addicionals al flux i, per tant, un augment de les pèrdues de càrrega tant en la fase líquida com gasosa.

Seguidament, es calcula el paràmetre de Lockhart-Martinelli a partir dels valors anteriors i la següent fórmula:

$$x = \left(\frac{\Delta P_L}{\Delta P_G} \right)^{0.5} \quad (\text{E-B.2})$$

Taula B.3. Paràmetre de Lockhart-Martinelli per cada relació L/D.

L/D	x
2	2.66
3	2.57
4	2.50

Finalment, es calcula la pèrdua de càrrega total amb la correlació de Larkins^[13] (E-B.3), utilitzant els valors típics a=0.416 i b=0.666.

$$\Delta P_{LG} = (\Delta P_L + \Delta P_G) * 10^{\left(\frac{a}{b + (\log x)^2} \right)} \quad (\text{E-B.3})$$

A continuació, a la Taula B.4 es poden veure els resultats de l'estudi.

Taula B.4. Resultats de l'estudi.

L/D	D (m)	L (m)	P _{LG} (kPa)
2	3.99	7.99	46.0
3	3.49	10.5	80.6
4	3.17	12.7	121

S'observa com la pèrdua de càrrega augmenta al mateix temps que la relació L/D. És a dir, un reactor molt llarg i prim no és recomanable, ja que la resistència al pas del fluid a través del llit incrementa notablement. Això comporta un increment del consum d'energia per bombeig i compressió dels reactius per mantenir el procés a 70 bar. Per tant L/D=4 es descarta.

Al comparar les relacions restants, tot i que L/D=2 presenta un pèrdua de càrrega menor, aquesta relació s'acaba descartant. En primer lloc, el fet de ser més curt i ample pot provocar problemes de distribució no uniforme i canalització de fluid, que compromet l'eficiència del procés i redueix la conversió efectiva. A més, el fet de tenir un diàmetre més gran implica un augment del gruix necessari a les parets del reactor, que suposa un increment dels costos de construcció i del pes estructural.

D'altra banda, una relació L/D més alta facilita la col·locació dels interns (safates de distribució, suport de catalitzador, llits d'inert i entrades de *quench*) en punts específics del reactor. Per aquests motius, s'escull la configuració amb L/D=3, que suposa un diàmetre i longitud de llit catalític de 3.49m i 10.46m, respectivament.

B.2 *Internals del reactor*

En aquest apartat es defineixen els *internals* del reactor i s'acaba de definir la seva geometria tenint en compte les necessitats constructives i operatives.

Tot i que el llit catalític ja ocupa 10.46 metres de longitud, com s'ha comentat a l'apartat anterior, encara hi falten safates de distribució, seccions amb inert i les entrades de *quench*. Per aquesta raó, es considera un marge de 3 metres; per allotjar tots aquests *internals*, resultant en una longitud de 13.46 metres. A més a més, han d'entrar en consideració els capçals del reactor, els quals són de tipus hemisfèric, ja que són els que ofereixen una resistència a la pressió interna per unitat de gruix més alta. Tot i que els el·líptics (2:1) són una alternativa molt eficient des de el punt de vista de l'espai que ocupen, ja que permeten reduir l'altura total el recipient, s'ha optat per aprofitar la llargada dels hemisfèrics per tal d'integrar *internals* com ara: la safata de distribució a la part superior que reparteix uniformement el cabal d'entrada pel llit i un suport per l'últim llit catalític al fons del reactor. Així doncs, caldrà sumar 3.49 metres referent als capçals, ja que cada un té una longitud equivalent al radi del reactor, donant un total de 17 metres aproximadament.

Seguidament, es mostra com s'han definit els punts exactes del reactor on figuren les entrades de *quench*. La Taula B.5 conté les variables i valors necessaris per dur a terme el càlcul. Els valors de massa de catalitzador on es realitzen els *quench*, s'han obtingut de la modelització amb MATLAB®.

Taula B.5. Variables i valors utilitzats al càlcul.

Variables	Valors
Volum de catalitzador al punt d'injecció 1	27,842 kg -> 27.842 m ³ ($\rho=1\text{tn/m}^3$)
Volum de catalitzador al punt d'injecció 2	40,678 kg -> 40.678 m ³ ($\rho=1\text{tn/m}^3$)
Longitud <i>internals</i> anteriors al <i>quench</i> 1 (safata + inert+ suport)	1.18 m
Longitud <i>internals</i> de <i>quench</i> 1 a 2 (safata + inert+ suport)	1 m
Longitud del capçal i radi del reactor	1.745 m

Utilitzant les següents fórmules, es trobarà la longitud des del cap del reactor fins a cada entrada de *quench*.

$$L_{Q1} = \frac{V_1}{\pi * R^2} + Capçal + Internals_1 \quad (\text{E-B.4})$$

$$L_{Q2} = L_{Q1} + \frac{V_2 - V_1}{\pi * R^2} + Internals_2 \quad (\text{E-B.5})$$

Substituint les equacions amb els valors de la taula anterior queda:

$$L_{Q1} = \frac{27.842}{\pi * 1.745^2} + 1.745 + 1.18 = 5.84 \text{ m} \quad (\text{E-B.6})$$

$$L_{Q2} = 5.84 + \frac{40.678 - 27.842}{\pi * 1.745^2} + 1 = 8.19 \text{ m} \quad (\text{E-B.7})$$

Les injeccions dels *quench* 1 i 2 es troben a 5.84 metres i 8.19 metres del cap del reactor respectivament. Una altra forma d'expressar-ho, és que el *quench* 2 es troba 2.35 metres per sota del primer, tal i com s'observa a la fitxa d'especificació.

B.3 Càlculs dels espessors del reactor

Per determinar l'espessor del reactor, tant del cos cilíndric com de les tapes hemisfèriques, s'ha seguit la normativa ASME Secció VIII, Divisió I^[4]. A continuació, es poden veure les fórmules utilitzades per al cilindre i per als fons respectivament:

$$t_{cilindre} = \frac{P \cdot R}{S \cdot E - 0.6 \cdot P} \quad (\text{E-B.8})$$

$$t_{capçals} = \frac{P \cdot D}{2S \cdot E - 0.2 \cdot P} \quad (\text{E-B.9})$$

On les variables presents són: P, la pressió en MPa, D o R, diàmetre o radi de la geometria en mm, S, valor del esforç del material en MPa i E, l'eficiència de la junta (soldadura).

Al càlcul dels espessors mostrats cal afegir un valor CA (corrosió admissible) en mil·límetres, un marge de seguretat en cas de corrosió, aquest es 1 mil·límetre en ambdós casos.

Per tal de determinar els espessors, primer s'ha determinat la geometria del tanc, així com el material del que està fet. Coneguda la geometria i triat un material, UNS K12554, s'ha procedit al càlcul dels espessors mínims tant del cos cilíndric com dels capçals.

Substituint en les equacions mostrades anteriorment queda:

$$t_{cilindre} = \frac{8.163 \text{ MPa} \cdot 1740 \text{ mm}}{287 \text{ MPa} \cdot 0.85 - 0.6 \cdot 8.163 \text{ MPa}} = 60.55 \text{ mm} \quad (\text{E-B.10})$$

$$t_{capçals} = \frac{8.163 \text{ MPa} \cdot 3480 \text{ mm}}{2 \cdot 287 \text{ MPa} \cdot 0.85 - 0.2 \cdot 8.163 \text{ MPa}} = 30.28 \text{ mm} \quad (\text{E-B.11})$$

A aquest valor s'ha de sumar el de corrosió admissible CA, el qual té un valor de 1 mm.

Finalment, aquest espessor s'han normalitzat amb els valors comercials, a la següent Taula B.6 es poden veure els resultats:

Taula B.6. Espessors normalitzats per al cilindre i els dos capçals.

Espessors (mm)	Mínims	Normalitzats (comercials)
Cilindre	60.55	63.50 (2 1/2")
Fons	30.28	31.81 (1 1/8")

Per tal de poder complir amb la normativa d'instal·lacions tèrmiques, la qual marca que cap superfície exposada al contacte accidental superi els 60°C^[11], es recobreix el reactor amb un aïllament tèrmic. Per les temperatures de treball del reactor (al voltant dels 380°C) s'ha decidit usar un aïllant de llana de roca, doncs dificulta l'absorció d'humitat i és un material que està disponible en mantes flexibles que faciliten la seva instal·lació.

Aquest gruix d'aïllant es pot determinar igualant el flux de calor total transferit al corresponent entre la superfície a protegir, com es veu a continuació:

$$\frac{T_{sup,ext} - T_{ext}}{\frac{1}{2\pi \cdot h_{ext} \cdot r_{ext}}} = \frac{T_{int} - T_{ext}}{\frac{1}{2\pi \cdot h_{int} \cdot r_{int}} + \sum_{\text{material}} \frac{\ln\left(\frac{r_{i+1}}{r_i}\right)}{2\pi \cdot k_i} + \frac{1}{2\pi \cdot h_{ext} \cdot r_{ext}}} \quad (\text{E-B.12})$$

Finalment, l'espessor s'ha sobredimensionat a un gruix de **25 mm**.

C. ESTIMACIÓ DE COSTOS DEL REACTOR

A continuació, es mostren els càlculs realitzats per obtenir les dades del cost del reactor. Aquest cost s'ha determinat amb l'equació següent descrita per *Turton* ^[19] en l'annex A del seu llibre:

$$\log_{10} C_p^o = k_1 + k_2 \log_{10} A + k_3 [\log_{10} A]^2 \tag{E-C.1}$$

On k_1 , k_2 i k_3 són paràmetres tabulats de cada equip i A és un factor de cada equip, com pot ser la pressió de disseny o l'àrea del equip.

La següent Taula C.1 mostra el cost base C_p^o de cada equip.

Taula C.1. Valors utilitzats per determinar els cost d'equips.

Equip	k1	k2	k3	A	Cp
R-101	3.4974	0.4485	0.1074	115	75,456

A continuació, a aquests costos cal afegir un factor per la pressió FP, i un per al material FM. Per determinar l'ajust de la pressió, s'ha utilitzat la equació que el llibre descriu per a *vessels*, apartat A.2.1 del llibre, doncs no se'n dona una d'específica per a reactors, i aquest actua igualment com recipient a pressió ASME. El valor del FP és de 9.71.

$$F_{P,vessel} = \frac{P \cdot D}{2 \cdot S \cdot E - 1.2 \cdot P} + CA \tag{E-C.2}$$

Seguidament, s'ha determinat el C_{BM} dels equips corregits amb l'equació:

$$C_{BM} = C_p^o F_{BM} = C_p^o (B_1 + B_2 F_M F_P) \tag{E-C.3}$$

On els factors B_1 i B_2 de cada equip es troben tabulats al *Turton*, sent 2.25 i 1.82 respectivament. El factor FM per a reactors és de 4.

A aquest cost cal afegir un factor final per adaptar els costos des de l'any de la creació de les taules de valors del *Turton* fins l'actualitat. Aquest valor, el CEPSI, és de 797.9 per al 2024 i tenia un valor de 394.3 al 2001.

El valor final del cost del reactor es mostra a la Taula C.2:

Taula C.2. Valors finals dels costos dels diferents equips

Equip	CBM 2024 (€)
R-101	10,500,000

D. DISSENY DE CANONADES

A partir del cabal volumètric i usant l'equació (E-D.1) es selecciona un diàmetre de canonada (ja normalitzat) que caigui dintre el rang dels valors típics de velocitat de la Taula D.1.

$$v = \frac{Q}{\pi * \left(\frac{D}{2}\right)^2} \quad (\text{E-D.1})$$

Taula D.1. Valors de velocitat típics

Fase	Velocitat (m/s)
Líquid	1-3
Gas	10-30
Bifàsic (L-G)	0.5-2.5

Seguidament amb l'equació (E-D.2) de l'ASME B31.3^[1], s'obté el gruix de les canonades, el qual serveix per escollir el SCH adequat a partir de les taules d'espessors de paret per a canonades segons ASME B36.10M.

$$v = \frac{P * D_{ext}}{2 * S * E + P * 0.4} + CA \quad (\text{E-D.2})$$

E. ANÀLISI HAZOP

Taula E.1. Hazop del diagrama de canonades i instrumentació del P&ID-101.

	Paraula Guia	Desviació	Causes	Conseqüències	C	F	R	Protecció	C	F	R	Accions
Més		Més flux oli	Fallada controlador FC-1004	Oli no reacciona per falta de massa de catalitzador, sortint reactius sense reaccionar del reactor, amb d'augment de la pressió. Possible ruptura catastròfica amb possibilitat d'explosió	4	-1	A	Vàlvula de seguretat PSV-1 (4 IPL) Enclavament SIL 3 (3 IPL) Línia de neteja per evitar obturació del reactor	4	-4	C	Alarma d'alta temperatura Alarma d'alta pressió Dissenyar PSV per aquest cas Obrir línia de neteja per evitar obturació del reactor
		Més flux H2	Fallada controlador PC-1005	Augment de la pressió Possible ruptura catastròfica amb possibilitat d'explosió	4	-1	A	Igual que en el cas de més flux oli	4	-5	C	Alarma d'alta pressió Dissenyar PSV per aquest cas
		Més flux quench	Fallada controlador FFC	Disminució de la temperatura, ofegament de la reacció. Productes intermedis sense reaccionar. Augment de la pressió. Possible ruptura catastròfica amb possibilitat d'explosió	4	-1	A	Igual que en el cas de més flux oli	4	-4	C	Alarma de baixa temperatura Alarma d'alta pressió Dissenyar PSV per aquest cas Obrir línia de neteja per evitar obturació del reactor
		Menys flux oli	Fallada controlador FC-1004	Disminució de la temperatura, ofegament de la reacció. Productes intermedis sense reaccionar. Augment de la pressió. Possible ruptura catastròfica amb possibilitat d'explosió	3	-1	B	Igual que en el cas de més flux quench	3	-4	C	Igual que en el cas de més flux quench

		Menys flux H2	Fallada controlador PC-1005	Hidrogenació incompleta. Productes intermedis sense reaccionar. Augment de la pressió. Possible ruptura catastròfica amb possibilitat d'explosió	3	-1	B	Igual que en el cas de menys flux oli	3	-4	C	Igual que en el cas de menys flux oli
		Menys flux <i>quench</i>	Fallada controlador FFC	Augment incontrolat de la temperatura de la reacció, amb possibilitat de <i>Runaway</i>	4	-1	A	Enclavament SIL 3 (3 IPL)	4	-4	C	Dissenyar l'enclavament Alarma d'alta temperatura Alarma de baix flux de <i>quench</i>
		No flux oli	Fallada controlador FC-1004	Parada de la producció. Sense perill per a la seguretat								
No		No flux H2	Fallada controlador PC-1005	Parada de la producció. Sense perill per a la seguretat								
		No flux <i>quench</i>	Fallada controlador FFC	Igual que menys flux de <i>quench</i>	4	-1	A	Igual que en el cas de més flux oli	4	-4	C	Igual que en el cas de més flux oli
Més		Més pressió a R-101	Fallada controlador PC-1005	Igual que en el cas de més flux d'H2	4	-1	A	Igual que en el cas de més flux d'H2	4	-4	C	Igual que en el cas de més flux d'H2
Menys		Menys pressió a R-101	Fallada controlador PC-1005	Hidrogenació incompleta. Possibilitat de flux invers	3	-1	A	Doble vàlvula <i>check</i> (2 IPL)	3	-3	B	Dissenyar les vàlvules <i>check</i>
Més		Més temperatura a R-101	Fallada del forn F-101	Degradació dels productes. Augment incontrolat de la temperatura de la reacció, amb possibilitat de <i>Runaway</i>	4	-1	A	Enclavament SIL 3 (3 IPL)	4	-4	B	Dissenyar l'enclavament Alarma d'alta temperatura

			Fallada del controlador FFC (<i>quench</i> i entrada)	Impossibilitat de refrigerar la reacció, augment de la temperatura. Possibilitat de ruptura catastròfica	4	-1	A	Igual que en el cas de menys flux de <i>quench</i>	4	-4	C	Igual que en el cas de menys flux de <i>quench</i>
			Foc extern	Possibilitat de ruptura catastròfica	4	-2	A	Vàlvula de seguretat PSV-1 (4 IPL) Cubeta (2 IPL)	4	-7	D	Disseny de la PSV i la cubeta Alarma foc extern
	Menys temperatura a R-101		Fallada del controlador FFC (<i>quench</i> i entrada H2)	Ofegament de la reacció. Productes intermedis sense reaccionar. Augment de la pressió. Possible ruptura catastròfica amb possibilitat d'explosió	3	-1	B	Igual que en el cas de menys flux oli	3	-4	C	Igual que en el cas de menys flux oli
			Fallada del forn F-101 o bescanviador E-102	Igual que el cas anterior	3	-1	B	Igual que el cas anterior	3	-4	C	Igual que el cas anterior
Altres	Erosió al reactor R-101 o <i>upstream</i>		Entrada de partícules solides en suspensió	Possibilitat d'obstrucció del llit catalític o ruptura de la canonada d'entrada al reactor. Fuga de producte a l'exterior	3	-3	C	Mateixa cubeta del cas de foc extern	3	-5	D	Disseny de la cubeta Alarma baix flux al reactor
	Contaminació del catalitzador		Concentracions de sulfurs elevades en l'oli	Desactivació del catalitzador, la reacció no té lloc. Sense perill per a la seguretat.								

F. FITXES DE SEGURETAT DELS COMPOSTOS

F.1. Oli d'oliva

ThermoFisher
SCIENTIFIC

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

según el Reglamento (CE) nº. 1907/2006

Fecha de preparación 09-sep-2014

Fecha de revisión 06-oct-2023

Número de Revisión 4

SECCIÓN 1: IDENTIFICACIÓN DE LA SUSTANCIA O LA MEZCLA Y DE LA SOCIEDAD O LA EMPRESA

1.1. Identificador del producto

Descripción del producto: **Olive Oil**
Cat No. : **416530000; 416530250; 416535000**
Sinónimos: Olive oil (edible).
Nº CAS: 8001-25-0

1.2. Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Uso recomendado: Productos químicos de laboratorio.
Usos desaconsejados: No hay información disponible

1.3. Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad

Empresa

Entidad de la UE / nombre de la empresa
Thermo Fisher Scientific
Janssen Pharmaceuticalaan 3a, 2440 Geel, Belgium

Nombre de la entidad / negocio del Reino Unido
Fisher Scientific UK
Bishop Meadow Road,
Loughborough, Leicestershire LE11 5RG, United Kingdom

Dirección de correo electrónico: begel.sdsdesk@thermofisher.com

1.4. Teléfono de emergencia

Para obtener información en **EE.UU.**, llame al: 001-800-227-6701
Para obtener información en **Europa**, llame al: +32 14 57 52 11

Número de emergencia, **Europa**: +32 14 57 52 99
Número de emergencia, **EE.UU.**: 001-201-796-7100

Número de teléfono de **CHEMTREC**, **EE.UU.**: 001-800-424-9300
Número de teléfono de **CHEMTREC**, **Europa**: 001-703-527-3887

SECCIÓN 2: IDENTIFICACIÓN DE LOS PELIGROS

2.1. Clasificación de la sustancia o de la mezcla

CLP clasificación - Reglamento (CE) n ° 1272/2008

Peligros físicos

ACR41653

Página 1 / 11

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Olive Oil

Fecha de revisión 06-oct-2023

A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Peligros para la salud
A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Peligros para el medio ambiente
A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación

Texto completo de las Indicaciones de peligro: ver la sección 16

2.2. Elementos de la etiqueta

No se requiere.

2.3. Otros peligros

Este producto no contiene ningún alterador del sistema endocrino conocido o sospechoso de serlo

SECCIÓN 3: COMPOSICIÓN/INFORMACIÓN SOBRE LOS COMPONENTES

3.1. Sustancias

Componente	Nº CAS	Nº CE	Porcentaje en peso	CLP clasificación - Reglamento (CE) n º 1272/2008
Aceite de oliva	8001-25-0	EEC No. 232-277-0	100	-

Texto completo de las Indicaciones de peligro: ver la sección 16

SECCIÓN 4: PRIMEROS AUXILIOS

4.1. Descripción de los primeros auxilios

Contacto con los ojos	Enjuagar inmediatamente con abundante agua, también bajo los párpados, durante al menos 15 minutos. Consultar a un médico inmediatamente si la irritación persiste.
Contacto con la piel	Lavar inmediatamente con jabón y abundante agua y quitarse la ropa y el calzado contaminados. En caso de irritación de la piel o reacciones alérgicas, llamar a un médico.
Ingestión	Nunca dar nada por boca a una persona inconsciente. Beber abundante agua. Consultar a un médico. Si es posible, beber leche después.
Inhalación	Alejarse de la fuente de exposición, tumbarse en el suelo. Transportar a la víctima al exterior. Si persisten los síntomas, llamar a un médico. Si no respira, realizar técnicas de respiración artificial.

ACR41653

Página 2 / 11

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Olive Oil

Fecha de revisión 06-oct-2023

Equipo de protección para el personal de primeros auxilios No se requieren precauciones especiales.

4.2. Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

No hay información disponible.

4.3. Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

Notas para el médico Tratar los síntomas.

SECCIÓN 5: MEDIDAS DE LUCHA CONTRA INCENDIOS**5.1. Medios de extinción****Medios de extinción apropiados**Dióxido de carbono (CO₂). Producto químico seco. espuma química.**Medios de extinción que no deben utilizarse por razones de seguridad**

No utilizar una corriente sólida de agua, ya que puede esparcir y extender el fuego.

5.2. Peligros específicos derivados de la sustancia o de la mezcla

Su descomposición térmica puede dar lugar a la liberación de vapores y gases irritantes.

Productos de combustión peligrososMonóxido de carbono (CO), Dióxido de carbono (CO₂).**5.3. Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios**

Como en cualquier incendio, llevar un aparato de respiración autónomo de presión a demanda MSHA/NIOSH (aprobado o equivalente) y todo el equipo de protección necesario.

SECCIÓN 6: MEDIDAS EN CASO DE VERTIDO ACCIDENTAL**6.1. Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia**

Asegurar una ventilación adecuada.

6.2. Precauciones relativas al medio ambiente

Para obtener más información ecológica, ver el apartado 12.

6.3. Métodos y material de contención y de limpieza

Absorber con material absorbente inerte. Mantener los productos combustibles (madera, papel, aceite, etc) alejados del material derramado.

6.4. Referencia a otras secciones

Consultar las medidas de protección en las listas de las secciones 8 y 13.

SECCIÓN 7: MANIPULACIÓN Y ALMACENAMIENTO**7.1. Precauciones para una manipulación segura**

ACR41653

Página 3 / 11

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Olive Oil

Fecha de revisión 06-oct-2023

Evitar el contacto con los ojos, la piel o la ropa. Retirar y lavar la ropa y los guantes contaminados, por dentro y por fuera, antes de volver a usarlos. Evitar respirar vapores o nieblas. No ingerir. En caso de ingestión, buscar inmediatamente asistencia médica. Lavarse bien después de manipular el producto.

Medidas higiénicas

Manipular respetando las buenas prácticas de higiene industrial y seguridad. Manténgase lejos de alimentos, bebidas y piensos. No comer, beber ni fumar durante su utilización. Retirar y lavar la ropa y los guantes contaminados, por dentro y por fuera, antes de volver a usarlos. Lavar las manos antes de los descansos y después de la jornada de trabajo.

7.2. Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Mantener en un lugar fresco, seco y bien ventilado.

7.3. Usos específicos finales

Uso en laboratorios

SECCIÓN 8: CONTROLES DE EXPOSICIÓN/PROTECCIÓN INDIVIDUAL**8.1 Parámetros de control****Límites de exposición**

Este producto, tal y como se ha suministrado, no contiene ningún material peligroso con límites de exposición laboral establecidos por las organismos reguladores específicos de la región

Valores límite biológicos

Este producto, tal como se suministra, no contiene ningún material peligroso con límites biológicos establecidos por los organismos reguladores regionales específicos

Métodos de seguimiento

EN 14042:2003 Título de identificación: Atmósferas en los lugares de trabajo. Directrices para la aplicación y uso de procedimientos para evaluar la exposición a agentes químicos y biológicos.

Nivel sin efecto derivado (DNEL) / Nivel de efecto mínimo derivado (DMEL)

No hay información disponible

Concentración prevista sin efecto (PNEC)

No hay información disponible.

ACR41653

Página 4 / 11

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Olive Oil

Fecha de revisión 06-oct-2023

8.2 Controles de la exposición

Medidas técnicas

Ninguna en condiciones normales de uso.

Equipos de protección personal

Protección de los ojos Utilizar gafas de seguridad con protectores laterales (o antiparras) (Norma de la UE - EN 166)

Protección de las manos Guantes protectores

Material de los guantes	Tiempo de penetración	Espesor de los guantes	Norma de la UE	Guante de los comentarios
Goma de nitrilo	Consulte las recomendaciones del fabricante	-	EN 374	(requisito mínimo)
Neopreno				
Caucho natural				
PVC				

Protección de la piel y el cuerpo Utilizar guantes y ropas de protección adecuados para evitar la exposición de la piel.

Inspeccione los guantes antes de su uso

Por favor, observe las instrucciones en cuanto a la permeabilidad y el tiempo de adelanto que son provistos por el proveedor de los guantes. (Consulte al fabricante / proveedor para obtener información).

Asegurarse de que los guantes son adecuados para la tarea

química compatibilidad, destreza, condiciones de funcionamiento

También tener en cuenta las condiciones locales específicas bajo las cuales el producto es utilizado, tal como el

Quítese los guantes con cuidado para evitar contaminación de la piel.

Protección respiratoria No necesario usar equipo protector en las condiciones normales de su uso.

A gran escala / uso de emergencia Utilice un NIOSH / MSHA o la norma europea EN 136 respirador aprobado si los límites de exposición son excedidos o irritación u otros síntomas son experimentados

Tipo de filtro recomendado: Partículas filtrar

Pequeña escala / uso en laboratorio Mantener una ventilación adecuada

Recomendado media máscara: - Válvula de filtrado: EN405; o; Media máscara: EN140; con filtro, ES141

Controles de exposición medioambiental No hay información disponible.

SECCIÓN 9: PROPIEDADES FÍSICAS Y QUÍMICAS

9.1. Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Estado físico	Líquido viscoso	Líquido
Aspecto	Amarillo	
Olor	Inodoro	
Umbral olfativo	No hay datos disponibles	
Punto/intervalo de fusión	0 °C / 32 °F	
Punto de reblandecimiento	No hay datos disponibles	
Punto /intervalo de ebullición	No hay información disponible	
Inflamabilidad (líquido)	No hay datos disponibles	
Inflamabilidad (sólido, gas)	No es aplicable	Líquido
Límites de explosión	No hay datos disponibles	

ACR41653

Página 5 / 11

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Olive Oil

Fecha de revisión 06-oct-2023

Punto de Inflamación	225 °C / 437 °F	Método - No hay información disponible
Temperatura de autoignición	No hay datos disponibles	
Temperatura de descomposición	No hay datos disponibles	
pH	No hay información disponible	
Viscosidad	No hay datos disponibles	
Solubilidad en el agua	No hay información disponible	
Solubilidad en otros disolventes	No hay información disponible	
Coefficiente de reparto (n-octanol/agua)		
Presión de vapor	No hay información disponible	
Densidad / Densidad relativa	0.914	
Densidad aparente	No es aplicable	Líquido
Densidad de vapor	No hay información disponible	(Aire = 1.0)
Características de las partículas	No es aplicable (Líquido)	

9.2. Otros datos

SECCIÓN 10: ESTABILIDAD Y REACTIVIDAD

10.1. Reactividad

Ninguno conocido, en base a la información facilitada

10.2. Estabilidad química

Estable en condiciones normales.

10.3. Posibilidad de reacciones peligrosas

Polimerización peligrosa No hay información disponible.
Reacciones peligrosas No hay información disponible.

10.4. Condiciones que deben evitarse

Productos incompatibles.

10.5. Materiales incompatibles

Agentes oxidantes fuertes.

10.6. Productos de descomposición peligrosos

Monóxido de carbono (CO). Dióxido de carbono (CO2).

SECCIÓN 11: INFORMACIÓN TOXICOLÓGICA

11.1. Información sobre las clases de peligro definidas en el Reglamento (CE) n.o 1272/2008

Información del producto No existe información de toxicidad aguda disponible para este producto

(a) toxicidad aguda;

Oral No hay datos disponibles
Cutánea No hay datos disponibles
Inhalación No hay datos disponibles

(b) corrosión o irritación cutáneas; No hay datos disponibles

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Olive Oil

Fecha de revisión 06-oct-2023

(c) lesiones o irritación ocular graves;	No hay datos disponibles
(d) sensibilización respiratoria o cutánea;	
Respiratorio	No hay datos disponibles
Piel	No hay datos disponibles
(e) mutagenicidad en células germinales;	No hay datos disponibles
(f) carcinogenicidad;	No hay datos disponibles Este producto no contiene componentes químicos reconocidos como carcinógenos
(g) toxicidad para la reproducción;	No hay datos disponibles
(h) toxicidad específica en determinados órganos (STOT) – exposición única;	No hay datos disponibles
(i) toxicidad específica en determinados órganos (STOT) – exposición repetida;	No hay datos disponibles
Órganos diana	No hay información disponible.
(j) peligro de aspiración;	No hay datos disponibles
Síntomas / efectos, agudos y retardados	No hay información disponible.

11.2. Información sobre otros peligros

Propiedades de alteración endocrina	Evaluar las propiedades de alteración endocrina en la salud humana. Este producto no contiene ningún alterador del sistema endocrino conocido o sospechoso de serlo.
-------------------------------------	--

SECCIÓN 12: INFORMACIÓN ECOLÓGICA

12.1. Toxicidad

Efectos de ecotoxicidad	No tirar los residuos por el desagüe. .
-------------------------	---

12.2. Persistencia y degradabilidad	No hay información disponible
--	-------------------------------

12.3. Potencial de bioacumulación	No hay información disponible
--	-------------------------------

12.4. Movilidad en el suelo	No hay información disponible
------------------------------------	-------------------------------

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Olive Oil

Fecha de revisión 06-oct-2023

12.5. Resultados de la valoración PBT y mPmB No hay datos disponibles para la evaluación.

12.6. Propiedades de alteración endocrina
Información del alterador del sistema endocrino Este producto no contiene ningún alterador del sistema endocrino conocido o sospechoso de serlo

12.7. Otros efectos adversos
Contaminantes Orgánicos Persistentes Este producto no contiene ningún conocido o sospechado sustancia
Potencial de reducción de ozono Este producto no contiene ningún conocido o sospechado sustancia

SECCIÓN 13: CONSIDERACIONES RELATIVAS A LA ELIMINACIÓN

13.1. Métodos para el tratamiento de residuos

Restos de residuos/productos sin usar Quienes generen residuos químicos deberán determinar si los productos químicos desechados se clasifican como residuos peligrosos. Los generadores de residuos químicos deberán consultar también las normativas locales, regionales y nacionales relativas a residuos peligrosos con el fin de asegurar una clasificación completa y exacta.

Embalaje contaminado Vaciar el contenido restante. Eliminar, observando las normas locales en vigor. No reutilizar los recipientes vacíos.

Catálogo de Desechos Europeos Según el Catálogo Europeo de Residuos, los códigos de residuos no son específicos del producto sino específicos de la aplicación.

Otra información El usuario debe asignar códigos de residuos basándose en la aplicación para la que se utilizó el producto.

SECCIÓN 14: INFORMACIÓN RELATIVA AL TRANSPORTE

IMDG/IMO No regulado

14.1. Número ONU
14.2. Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas
14.3. Clase(s) de peligro para el transporte
14.4. Grupo de embalaje

ADR No regulado

14.1. Número ONU
14.2. Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas
14.3. Clase(s) de peligro para el transporte
14.4. Grupo de embalaje

IATA No regulado

14.1. Número ONU

ACR41653

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Olive Oil

Fecha de revisión 06-oct-2023

14.2. Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas**14.3. Clase(s) de peligro para el transporte****14.4. Grupo de embalaje****14.5. Peligros para el medio ambiente**

No hay peligros identificados

14.6. Precauciones particulares para los usuarios No se requieren precauciones especiales.**14.7. Transporte marítimo a granel con arreglo a los instrumentos de la OMI** No aplicable, productos envasados**SECCIÓN 15: INFORMACIÓN REGLAMENTARIA****15.1. Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla****Inventarios internacionales**

Europa (EINECS/ELINCS/NLP), China (IECSC), Taiwan (TCSI), Korea (KECL), Japan (ENCS), Japan (ISHL), Canadá (DSL/NDSL), Australia (AICS), New Zealand (NZIoC), Filipinas (PICCS). US EPA (TSCA) - Toxic Substances Control Act, (40 CFR Part 710)

Componente	Nº CAS	EINECS	ELINCS	NLP	IECSC	TCSI	KECL	ENCS	ISHL
Aceite de oliva	8001-25-0	232-277-0	-	-	X	X	KE-27401	-	-

Componente	Nº CAS	TSCA	TSCA Inventory notification - Active-Inactive	DSL	NDSL	AICS	NZIoC	PICCS
Aceite de oliva	8001-25-0	X	ACTIVE	X	-	X	X	X

Leyenda: X - Incluido ' ' - Not Listed KECL - NIER number or KE number (<http://ncis.nier.go.kr/en/main.do>)**Autorización / Restricciones según EU REACH**

No es aplicable

Componente	Nº CAS	REACH (1907/2006) - Anexo XIV - sustancias sujetas a autorización	REACH (1907/2006) - Anexo XVII - Restricciones a la utilización de determinadas sustancias peligrosas	Reglamento REACH (EC 1907/2006) artículo 59 - Lista de sustancias candidatas altamente preocupantes (SVHC)
Aceite de oliva	8001-25-0	-	-	-

Seveso III Directive (2012/18/EC)

Componente	Nº CAS	Directiva Seveso III (2012/18/EU) - cantidades umbral para la notificación de accidentes graves	Directiva Seveso III (2012/18/CE) - Cantidades que califican para los requisitos de informe de seguridad
Aceite de oliva	8001-25-0	No es aplicable	No es aplicable

Reglamento (CE) n.º 649/2012 del Parlamento Europeo y del Consejo, de 4 de julio de 2012, relativo a la exportación e importación de productos químicos peligrosos

No es aplicable

¿Contiene componente(s) que cumplen una 'definición' de sustancia per y polifluoroalquilo (PFAS)?

No es aplicable

ACR41653

Página 9 / 11

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Olive Oil

Fecha de revisión 06-oct-2023

Tome nota de la Directiva 98/24/CE relativa a la protección de la salud y la seguridad de los trabajadores contra los riesgos relacionados con los agentes químicos durante el trabajo .

Reglamentos nacionales

Clasificación WGK Ver la tabla de valores

Componente	Alemania Clasificación de las Aguas (AwSV)	Alemania - TA-Luft Class
Aceite de oliva	awg	

15.2. Evaluación de la seguridad química

Un Seguridad Química Evaluación / Informe (CSA / CSR) no se ha llevado a cabo

SECCIÓN 16: OTRA INFORMACIÓN

Texto completo de las indicaciones H mencionadas en las secciones 2 y 3

Leyenda

- | | |
|--|---|
| CAS - Chemical Abstracts Service | TSCA - Ley de control de sustancias tóxicas (Toxic Substances Control Act) estadounidense, apartado 8(b), Inventario |
| EINECS/ELINCS : Inventario europeo de sustancias químicas comercializadas existentes/Lista europea de sustancias químicas notificadas | DSL/NDL - Lista de sustancias domésticas/no domésticas de Canadá |
| PICCS - Inventario de productos químicos y sustancias químicas de Filipinas | ENCS - Inventario japonés de sustancias químicas existentes y nuevas |
| IECSC - Inventario chino de sustancias químicas existentes | AICS - Inventario australiano de sustancias químicas (Australian Inventory of Chemical Substances) |
| KECL - Sustancias químicas existentes y evaluadas de Corea | NZIoC - Inventario de productos químicos de Nueva Zelanda |
| WEL - Límites de exposición profesionales | TWA - Tiempo Promedio Ponderado |
| ACGIH - American Conference of Governmental Industrial Hygienists (Conferencia Americana de Higienistas Industriales Gubernamentales) | IARC - Agencia Internacional para la Investigación del Cáncer |
| DNEL - Nivel obtenido sin efecto | Concentración prevista sin efecto (PNEC) |
| RPE - Equipos de protección respiratoria | LD50 - Dosis Letal 50% |
| LC50 - Concentración letal 50% | EC50 - Concentración efectiva 50% |
| NOEC - Concentración sin efecto observado | POW - Coeficiente de reparto octanol: agua |
| PBT - Persistentes, bioacumulativas, tóxicas | vPvB - Muy persistente y muy bioacumulable |
| ADR - Acuerdo europeo sobre el transporte internacional de mercancías peligrosas por carretera | ICAO/IATA - International Civil Aviation Organization/International Air Transport Association |
| IMO/IMDG - International Maritime Organization/International Maritime Dangerous Goods Code | MARPOL - Convenio Internacional para Prevenir la Contaminación por los Buques |
| OECD - Organización para la Cooperación y el Desarrollo | ATE - Estimación de la toxicidad aguda |
| BCF - Factor de bioconcentración (FBC) | COV - (compuesto orgánico volátil) |
- Bibliografía fundamental y fuentes de datos**
<https://echa.europa.eu/information-on-chemicals>
 Los proveedores de datos de seguridad, ChemADVISOR - LOLI, Merck Index, RTECS

ACR41653

Página 10 / 11

FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Olive Oil

Fecha de revisión 06-oct-2023

Consejo de formación

Formación de concienciación sobre peligros químicos, cubriendo etiquetado, fichas de datos de seguridad, equipos de protección personal e higiene.

Fecha de preparación

09-sep-2014

Fecha de revisión

06-oct-2023

Resumen de la revisión

No es aplicable.

La hoja técnica de seguridad cumple con los requisitos del Reglamento (CE) No. 1907/2006. REGLAMENTO (UE) 2020/878 DE LA COMISIÓN por el que se modifica el anexo II del Reglamento (CE) n.o 1907/2006 .

Descargo de responsabilidad

La información facilitada en esta Ficha de Datos de Seguridad es correcta, a nuestro leal saber y entender, en la fecha de su publicación. Dicha información está concebida únicamente como guía para la seguridad en la manipulación, el uso, el procesamiento, el almacenamiento, el transporte, la eliminación y la liberación, no debiendo tomarse como garantía o especificación de calidades. La información se refiere únicamente al material específico mencionado y puede no ser válida para tal material usado en combinación con cualesquiera otros materiales o en cualquier proceso salvo que se especifique expresamente en el texto

Fin de la ficha de datos de seguridad



HIDRÓGENO

FDS Ref.: ESP-H2-067A

Etiquetado según el Reglamento (CE) N° 1272/2008 [CLP]

Pictogramas de peligro (CLP) :



GHS02

GHS04

Palabra de advertencia (CLP) :

Peligro

Indicaciones de peligro (CLP) :

H220 - Gas extremadamente inflamable
H280 - Contiene gas a presión; peligro de explosión en caso de calentamiento.

Consejos de prudencia (CLP)

- Prevención : P210 - Mantener alejado del calor, de superficies calientes, de chispas, de llamas abiertas y de cualquier otra fuente de ignición. No fumar
- Respuesta : P377 - Fuga de gas en llamas: No apagar, salvo si la fuga puede detenerse sin peligro
P381 - Eliminar todas las fuentes de ignición si no hay peligro en hacerlo
- Almacenamiento : P403 - Almacenar en un lugar bien ventilado

2.3. Otros peligros

: Ninguno

SECCIÓN 3: Composición/información sobre los componentes

3.1. Sustancias

Nombre	Identificador del producto	%	Clasificación según reglamento (UE) No. 1272/2008 [CLP]
HIDRÓGENO	(N° CAS) 1333-74-0 (N° CE) 215-605-7 (N° Índice) 001-001-00-9 (Número de registro) *1	100	Flam. Gas 1, H220 Press. Gas (Comp.), H280

No contiene otros componentes o impurezas que puedan influir en la clasificación del producto.

*1: Figura en la lista del Anexo IV / V de REACH, exento de solicitud de registro.

*2: No ha expirado el plazo límite de solicitud de registro.

*3: No exige su registro. Sustancias fabricadas o importadas < 1t/y.

Texto completo de declaraciones-H, véase capítulo 16.

3.2. Mezclas : No aplicable

SECCIÓN 4: Primeros auxilios

4.1. Descripción de los primeros auxilios

- Inhalación : Retirar a la víctima a un área no contaminada llevando colocado el equipo de respiración autónoma. Mantener a la víctima caliente y en reposo. Llamar al doctor. Aplicar la respiración artificial si se para la respiración
- Contacto con la piel : No se esperan efectos adversos de este producto
- Contacto con los ojos : No se esperan efectos adversos de este producto
- Ingestión : La ingestión no está considerada como una vía potencial de exposición

4.2. Principales síntomas y efectos, agudos y retardados



HIDRÓGENO

FDS Ref.: ESP-H2-067A

: A elevadas concentraciones puede causar asfixia. Los síntomas pueden incluir la pérdida de la consciencia o de la movilidad. La víctima puede no haberse dado cuenta de la asfixia

4.3. Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

: Ninguno

SECCIÓN 5: Medidas de lucha contra incendios

5.1. Medios de extinción

- Medios de extinción adecuados : Agua en spray o en nebulizador
Polvo seco
- Medios de extinción inadecuados : No usar agua a presión para extinguirlo
Dióxido de carbono

5.2. Peligros específicos derivados de la sustancia o la mezcla

- Peligros específicos : La exposición al fuego puede causar la rotura o explosión de los recipientes
- Productos de combustión peligrosos : Ninguno

5.3. Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

- Métodos específicos : Utilizar medidas de control de incendios apropiadas con el incendio circundante. La exposición de los envases de gas al fuego y al calor puede provocar su ruptura. Enfriar los envases dañados con chorro de agua pulverizada desde una posición protegida. No vaciar el agua contaminada por el fuego en los desagües
Si es posible detener la fuga de producto
Usar agua en spray o en nebulizador para disipar humos de incendios
No extinguir una fuga de gas inflamada si no es absolutamente necesario. Se puede producir la reignición espontánea explosiva. Extinguir los otros fuegos
Desplazar los contenedores lejos del área del fuego si ello se puede hacer sin riesgo
- Equipo de protección especial para extinción de incendios : En espacios confinados utilizar equipos de respiración autónoma de presión positiva
Vestimenta y equipo de protección standard (aparato de respiración autónoma) para bomberos Standard EN 137-mascara de cara completa que incluya un aparato de respiración autónomo de aire comprimido en circuito abierto
EN 469: Vestimenta protectora para bomberos. EN 659: Guantes de protección para bomberos

SECCIÓN 6: Medidas en caso de vertido accidental

6.1. Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

- : Evacuar el área
Téngase en cuenta el riesgo de atmósferas explosivas
Utilizar equipos de respiración autónoma cuando entren en el área a menos que esté probado que la atmósfera es segura
Eliminar las fuentes de ignición
Asegurar la adecuada ventilación de aire
Actuar de acuerdo con el plan de emergencia local
Mantenerse en la parte de donde sopla el viento

6.2. Precauciones relativas al medio ambiente

- : Intentar parar el escape/derrame

6.3. Métodos y material de contención y de limpieza

- : Ventilar la zona

6.4. Referencia a otras secciones

- : Ver también las Secciones 8 y 13

SECCIÓN 7: Manipulación y almacenamiento

7.1. Precauciones para una manipulación segura

Messer Ibérica de Gases, SAU
Autovía Tarragona-Salou, Km. 3,8
43480 Vilaseca (Tarragona) España
+34 977 30 95 00

ES (español)

FDS Ref.: ESP-H2-067A

3/9



HIDRÓGENO

FDS Ref.: ESP-H2-067A

- Uso seguro del producto

 - : La sustancia debe manipularse según procedimientos de higiene industrial y de seguridad reconocidos
 - Solo personas experimentadas y debidamente entrenadas deben manejar gases sometidos a presión
 - Considerar los instrumentos de reducción de la presión en las instalaciones de gas.
 - Comprobar que el conjunto del sistema de gas ha sido, o es con regularidad, revisado antes de usarse respecto a la posibilidad de escapes
 - No fumar cuando se manipule el producto
 - Utilizar solo equipo específicamente apropiado para este producto y para su presión y temperatura de suministro, en caso de duda contacte con su suministrador
 - Tener en cuenta el riesgo de una posible atmosfera susceptible de explotar y la necesidad de disponer de un equipo que pruebe la explosión
 - Purgar el aire del sistema antes de introducir el gas
 - Tomar medidas de precaución contra descargas electrostáticas
 - Mantener lejos de fuentes de ignición, incluyendo descarga estática
 - Considerar el uso de herramientas que no emitan chispas
 - No inhalar gas
 - Evitar la difusión del producto en la atmosfera.

- Manipulación segura del envas del gas

 - : Solicitar del suministrador las instrucciones de manipulación de los contenedores
 - No permitir el retroceso hacia el interior del recipiente
 - Proteger las botellas de los daños materiales, no arrastrar, ni rodar, deslizar ó dejar caer
 - Si mueve botellas, incluso en pequeños recorridos, use una carretilla (mecanica, manual, etc) diseñada para transportar botellas
 - Mantener colocada la caperuza de la valvula hasta que el envase quede fijo contra una pared, un banco ó situado en una plataforma, y ya dispuesto para su uso
 - Si el usuario aprecia cualquier problema en una valvula de una botella en uso, termine su utilización y contacte al suministrador
 - Nunca intentar reparar ó modificar las valvulas de los depositos ó los mecanismos de seguridad
 - Las valvulas que estan dañadas deben ser inmediatamente comunicadas al suministrador
 - Mantener los accesorios de la valvula del deposito libre de contaminantes, especialmente aceites y agua
 - Reponer la caperuza de la valvula ó del depósito si se facilitan por el suministrador, siempre que el envase quede desconectado del equipo
 - Cierre la valvula del del deposito despues de su uso y cuando quede vacio, incluso si aún esta conectado al equipo
 - No intentar nunca trasvasar gases de una botella/envase a otro
 - No utilizar nunca mecanismos con llamas ó de calentamiento electrico para elevar la presión del deposito
 - No quitar ni desfigurar las etiquetas facilitadas por el suministrador para identificar el contenido de las botellas
 - Debe prevenirse la filtración de agua al interior del recipiente.

7.2. Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

- : Observar todas las regulaciones y los requerimientos locales relativos al almacenamiento de contenedores
- Los contenedores no deben ser almacenados en condiciones que favorezcan la corrosión
- Las protecciones de las valvulas y las caperuzas deben estar colocadas
- Los contenedores deben de ser almacenados en posición vertical y debidamente asegurados para evitar su caída
- Los contenedores almacenados deben ser comprobados periodicamente respecto a su estado general y a posibles fugas
- Mantener el contenedor por debajo de 50°C, en un lugar bien ventilado
- Almacenar los contenedores en un lugar libre del riesgo y lejos de fuentes de calor e ignición
- Mantener alejado de materiales combustibles
- Separa de los gases oxidantes o de otros materiales oxidantes durante el almacenamiento
- Todos los equipos electricos en las areas de almacenamiento deben ser compatibles con el riesgo de una posible atmosfera explosiva.

7.3. Usos específicos finales

- : Ninguno.

SECCIÓN 8: Controles de exposición/protección individual

8.1. Parámetros de control

Messer Ibérica de Gases, SAU
 Autovía Tarragona-Salou, Km. 3,8
 43480 Vilaseca (Tarragona) España
 +34 977 30 95 00

ES (español)

FDS Ref.: ESP-H2-067A

4/9



HIDRÓGENO

FDS Ref.: ESP-H2-067A

OEL (Límites de exposición profesional) : Sin datos disponibles.
 DNEL (Nivel sin efecto derivado) : Sin datos disponibles.
 PNEC (Concentración prevista sin efecto) : Sin datos disponibles.

8.2. Controles de la exposición

8.2.1. Controles técnicos apropiados

: Proporcionar ventilación adecuada, general y local, a los gases de escape
 Los sistemas sujetos a presión deben ser regularmente comprobados respecto a fugas
 Detectores de gases deben de ser usados siempre que gases/vapores inflamables pueden ser emitidos
 Considerar un sistema de permisos de trabajo p.ej para trabajos de mantenimiento

8.2.2. Equipo de protección personal

: Un analisis de riesgos debe ser realizado y formalizado en cada area de trabajo para evaluar los riesgos relacionados con el uso del producto y para determinar el PPE que provoca un riesgo relevante. Estas recomendaciones deben ser tenidas en cuenta
 PPE que cumplan los estandares recomendados por EN/ISO deben seleccionarse

• Protección para el ojo/cara : usar gafas con de seguridad con protecciones laterales
 Estándar EN 166- Protección ocular-especificaciones

• Protección para la piel
 - Protección de las manos : Usar guantes de trabajo al manejar envases de gases
 Standard EN 388- guantes que protegen contra riesgos mecanicos
 - Otras : Considerar el uso de prendas de seguridad resistentes a llama antiestatica
 Estándar EN ISO 14116- Materiales que limitan la difusión de llamas
 Standard EN ISO 1149-5- Ropa de protección: Propiedades electrostaticas
 Usar zapatos de seguridad mientras se manejan envases
 Standard EN ISO 20345 - Equipos de protección personal-zapatos de seguridad

• Protección de las vias respiratorias : No necesaria

• Peligros térmicos : No necesaria

8.2.3. Controles de exposición medioambiental

: No se requieren especificas medidas de gestión distintas de los procedimientos de buena higiene industrial y seguridad.

SECCIÓN 9: Propiedades físicas y químicas

9.1. Información sobre propiedades físicas y químicas básicas

Apariencia
 • Estado físico a 20°C / 101.3kPa : Gas.
 • Color : Incoloro.
 Olor : Inoloro.
 Umbral olfativo : La superación de limites por el olor es subjetiva e inadecuado para advertir del riesgo de sobrecarga.
 Valor de pH : Inaplicable.
 Masa molecular : 2 g/mol
 Punto de fusión : -259 °C
 Punto de ebullición : -253 °C
 Punto de inflamación : No es aplicable a gases ni a mezcla de gases.
 Temperatura crítica [°C] : -240 °C
 Velocidad de evaporación (éter=1) : No es aplicable a gases ni a mezcla de gases.



HIDRÓGENO

FDS Ref.: ESP-H2-067A

Rango de inflamabilidad	: 4 - 77 vol %
Presión de vapor [20°C]	: Inaplicable.
Presión de vapor [50°C]	: Inaplicable.
Densidad relativa del gas (aire=1)	: 0,07
Densidad relativa del líquido (agua=1)	: 0,07
Solubilidad en agua	: 1,6 mg/l
Coefficiente de reparto n-octanol/agua [log Kow]	: No es aplicable a gases inorganicos.
Temperatura de auto-inflamación	: 560 °C
Viscosidad [20°C]	: Inaplicable.
Propiedades explosivas	: Inaplicable
Propiedades comburentes	: Ninguno

9.2. Otros datos

Otros datos : Se quema con una llama invisible

SECCIÓN 10: Estabilidad y reactividad

10.1. Reactividad

: Sin riesgo de reactividad salvo lo expresado en la sub-seccion mas adelante

10.2. Estabilidad química

: Estable en condiciones normales

10.3. Posibilidad de reacciones peligrosas

: Puede reaccionar violentamente con materias oxidantes
Puede formar mezclas explosivas con el aire

10.4. Condiciones que deben evitarse

: Manténgase alejado de fuentes de calor, chispas, llama abierta o superficies calientes. – No fumar

10.5. Materiales incompatibles

: Aire, Oxidante
Para información complementaria sobre su compatibilidad referirse a la ISO 11114

10.6. Productos de descomposición peligrosos

: Productos con riesgo de descomposición no se deben producir en condiciones normales de almacenamiento y uso

SECCIÓN 11: Información toxicológica

11.1. Información sobre los efectos toxicológicos

Toxicidad aguda	: No se conocen los efectos toxicológicos de este producto
corrosión o irritación cutáneas	: Se desconocen los efectos de este producto
lesiones o irritación ocular graves	: Se desconocen los efectos de este producto
sensibilización respiratoria o cutánea	: Se desconocen los efectos de este producto
Mutagenicidad	: Se desconocen los efectos de este producto
Carcinogénesis	: Se desconocen los efectos de este producto
Tóxico para la reproducción : fertilidad	: Se desconocen los efectos de este producto
Tóxico para la reproducción : feto	: Se desconocen los efectos de este producto
toxicidad específica en determinados órganos (STOT) – exposición única	: Se desconocen los efectos de este producto
toxicidad específica en determinados órganos (STOT) – exposición repetida	: Se desconocen los efectos de este producto
peligro de aspiración	: No es aplicable a gases ni a mezcla de gases

Messer Ibérica de Gases, SAU
Autovía Tarragona-Salou, Km. 3,8
43480 Vilaseca (Tarragona) España
+34 977 30 95 00

ES (español)

FDS Ref.: ESP-H2-067A

6/9



HIDRÓGENO

FDS Ref.: ESP-H2-067A

SECCIÓN 12: Información ecológica

12.1. Toxicidad

Evaluación : Este producto no causa daños ecológicos.

12.2. (RA2 12.2.SH) Persistencia y degradabilidad

Evaluación : Este producto no causa daños ecológicos.

12.3. (RA2 12.3SH) Potencial de bioacumulación

Evaluación : Este producto no causa daños ecológicos.

12.4. Movilidad en el suelo

Evaluación : Este producto no causa daños ecológicos.

12.5. Resultados de la valoración PBT y mPmB

Evaluación : No se clasifica como PBT o vPvB

12.6. Otros efectos adversos

Efectos sobre la capa de ozono : Ninguno

Factor de calentamiento global [CO2=1] : 6

Produce efectos en el calentamiento global : Se desconocen los efectos de este producto

SECCIÓN 13: Consideraciones relativas a la eliminación

13.1. Métodos para el tratamiento de residuos

No descargar en áreas donde hay riesgo de que se forme una mezcla explosiva con el aire. El gas residual debe ser quemado a través de un quemador adecuado que disponga de antirretroceso de llama

No descargar dentro de ningún lugar donde su acumulación pudiera ser peligrosa
Asegurarse de no superar los límites de emisión establecidos en regulaciones locales

Lista de residuos peligrosos : 16 05 04: Contenedores de gases a presión (incluido halones) que contienen sustancias peligrosas

13.2. Informaciones complementarias

: Ninguno

SECCIÓN 14: Información relativa al transporte

14.1. Número ONU

Nº ONU : 1049

14.2. Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas

Transporte por carretera/ferrocarril (ADR/RID) : HIDRÓGENO COMPRIMIDO

Transporte por aire (ICAO-TI / IATA-DGR) : Hydrogen, compressed

Transporte por mar (IMDG) : HYDROGEN, COMPRESSED

14.3. Clase(s) de peligro para el transporte

Messer Ibérica de Gases, SAU
Autovía Tarragona-Salou, Km. 3,8
43480 Vilaseca (Tarragona) España
+34 977 30 95 00

ES (español)

FDS Ref.: ESP-H2-067A

7/9



HIDRÓGENO

FDS Ref.: ESP-H2-067A

Etiquetado : 
2.1 : Gases inflamables

Transporte por carretera/ferrocarril (ADR/RID)

Clase : 2
Codigo de clasificacion : 1F
Identificación del peligro : 23
Restricciones en Tunel : B/D - Transporte en cisternas: Prohibido el paso por túneles de categorías B, C, D y E; Otros transportes: Prohibido el paso por túneles de categorías D y E

Transporte por aire (ICAO-TI / IATA-DGR)

Tipo / Div. (Sub. riesgo) : 2.1

Transporte por mar (IMDG)

Tipo / Div. (Sub. riesgo) : 2.1
Instrucciones de Emergencia (IE) - Fuego : F-D
Instrucciones de Emergencia (IE) - Escape : S-U

14.4. Grupo de embalaje

Transporte por carretera/ferrocarril (ADR/RID) : No aplicable
Transporte por aire (ICAO-TI / IATA-DGR) : No aplicable
Transporte por mar (IMDG) : No aplicable

14.5. Peligros para el medio ambiente

Transporte por carretera/ferrocarril (ADR/RID) : Ninguno.
Transporte por aire (ICAO-TI / IATA-DGR) : Ninguno.
Transporte por mar (IMDG) : Ninguno.

14.6. Precauciones particulares para los usuarios

Packing Instruction(s)

Transporte por carretera/ferrocarril (ADR/RID) : P200
Transporte por aire (ICAO-TI / IATA-DGR)
Avion de pasaje y carga : Prohibido
Avion de carga solo : 200
Transporte por mar (IMDG) : P200

Medidas de precaución especiales para el transporte : Evitar el transporte en los vehiculos donde el espacio de la carga no esté separado del compartimiento del conductor
Asegurar que el conductor está enterado de los riesgos potenciales de la carga y que conoce que hacer en caso de un accidente o de una emergencia
Antes de transportar las botellas :
- Asegurar una ventilación adecuada
- Asegúrese de que los recipientes están ben fijados
- Asegurarse que las válvulas de las botellas están cerradas y no fugan
- Asegurarse que el tapón del acoplamiento de la válvula (cuando exista) está adecuadamente apretado
- Asegurarse que la caperuza de la válvula o la tulipa, (cuando exista), está adecuadamente apretada.

Messer Ibérica de Gases, SAU
Autovía Tarragona-Salou, Km 3,8
43480 Vilaseca (Tarragona) España
+34 977 30 95 00

ES (español)

FDS Ref.: ESP-H2-067A

8/9



HIDRÓGENO

FDS Ref.: ESP-H2-067A

14.7. Transporte a granel con arreglo al anexo II del Convenio MARPOL y el Código IBC

: Inaplicable.

SECCIÓN 15: Información reglamentaria

15.1. Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

UE-Reglamentos

Restricciones de utilización : Ninguno
 Directiva 2012/18/EU (Seveso III) : Figura en la lista

Reglamentos nacionales

Legislación Nacional (texto) : Asegúrese que se cumplen las normativas nacionales y locales.
 Clase de peligro para el agua (WGK) : -
 Kenn-Nº : 741

15.2. Evaluación de la seguridad química

: Un CSA (Análisis de seguridad química) no debe de realizarse para este producto

SECCIÓN 16: Información adicional

Indicación de modificaciones : Hoja de datos de seguridad revisada de acuerdo con la regulación de la Comisión (UE) Nº2015/830.
 Consejos de formación : Asegurarse que los operarios conocen el riesgo de inflamabilidad. El riesgo de asfixia es a menudo despreciado y debe ser recalado durante la formación de los operarios.
 Información adicional : La presente Ficha de Datos de Seguridad está establecida de acuerdo con las Directivas Europeas en vigor.

Texto íntegro de las frases H y EUH

Flam. Gas 1	Gases inflamables, Categoría 1
Press. Gas (Comp.)	Gas a presión : Gas comprimido
H220	Gas extremadamente inflamable
H280	Contiene gas a presión; peligro de explosión en caso de calentamiento

RENUNCIA DE RESPONSABILIDAD

: Antes de utilizar el producto en un nuevo proceso o experimento, debe llevarse a cabo un estudio completo de seguridad y de compatibilidad de los materiales
 Los detalles dados son ciertos y correctos en el momento de llevarse este documento a impresión
 A pesar de que durante la preparación de este documento se ha tomado especial cuidado, no se acepta ninguna responsabilidad por las lesiones o los daños resultantes

Fin del documento

F.3. Octadecà**FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD**

Esta ficha de datos de seguridad ha sido elaborada de conformidad con los requisitos de:
Reglamento (CE) N° 1907/2006 y Reglamento (CE) N° 1272/2008

Fecha de revisión 15-may.-2023

Número de Revisión 1

SECCIÓN 1: Identificación de la sustancia o la mezcla y de la sociedad o la empresa**1.1. Identificador del producto**

Código(s) del producto	DRE-C15710100
Nombre del Producto	n-Octadecane
Formulario	No es aplicable

NOTA [8] - No se indica ningún número de registro para esta sustancia porque está por debajo del umbral recogido en el Artículo 6(1) de REACH y no está sujeta a los requisitos de registro de conformidad con el Título II de REACH

EC No (EU Index No)	209-790-3
N° CAS	593-45-3
Nombre químico	Octadecane
Sustancia/mezcla pura	Sustancia
Fórmula	C18H38
Peso molecular	254.5

1.2. Usos pertinentes identificados de la sustancia o de la mezcla y usos desaconsejados

Uso recomendado	Uso de laboratorio
Usos desaconsejados	No hay información disponible

1.3. Datos del proveedor de la ficha de datos de seguridad**Proveedor**

LGC Standards SLU
C/ Salvador Espriu 59, 2º planta
08005 Barcelona
SPAIN

Tel : +34 (0) 93 308 4181
Fax : +34 (0) 93 307 3612
eMail : es@lgcstandards.com

Web : www.lgcstandards.com

Para obtener más información, póngase en contacto con



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Esta ficha de datos de seguridad ha sido elaborada de conformidad con los requisitos de:
Reglamento (CE) N° 1907/2006 y Reglamento (CE) N° 1272/2008

Fecha de revisión 15-may.-2023

Número de Revisión 1

DRE-C15710100 - n-Octadecane

Dirección de correo electrónico sds-request@lgcgroup.com

1.4. Teléfono de emergencia

Teléfono de emergencia

En caso de accidente con materiales peligrosos o mercancía peligrosas, derrames, fugas, exposición al fuego o incidente Llame a Chemtrec: USA & Canada 1-800-424-9300
Resto del mundo +1 703-741-5970

Teléfono de emergencia - §45 - (CE)1272/2008	
Europa	112
Austria	No hay información disponible
Bulgaria	
Croacia	
Chipre	
República Checa	
Dinamarca	
Francia	
Hungría	
Irlanda	
Italia	
Lituania	
Luxemburgo	
Países Bajos	
Noruega	
Portugal	
Rumanía	
Eslovaquia	
Eslovenia	
España	
Suecia	
Suiza	

SECCIÓN 2: Identificación de los peligros

2.1. Clasificación de la sustancia o de la mezcla

Reglamento (CE) N° 1272/2008

Peligro por aspiración

Categoría 1 - (H304)

2.2. Elementos de la etiqueta

Contiene Octadecane



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Esta ficha de datos de seguridad ha sido elaborada de conformidad con los requisitos de:
Reglamento (CE) N° 1907/2006 y Reglamento (CE) N° 1272/2008

Fecha de revisión 15-may.-2023

Número de Revisión 1

DRE-C15710100 - n-Octadecane



Palabra de advertencia
Peligro

Indicaciones de peligro

H304 - Puede ser mortal en caso de ingestión y penetración en las vías respiratorias
EUH066 - La exposición repetida puede provocar sequedad o formación de grietas en la piel

Consejos de prudencia - UE (§28, 1272/2008)

P301 + P310 - EN CASO DE INGESTIÓN: Llamar inmediatamente a un CENTRO DE TOXICOLOGÍA o a un médico
P331 - NO provocar el vómito
P405 - Guardar bajo llave
P501 - Eliminar el contenido/el recipiente en una planta de eliminación de residuos autorizada

2.3. Otros peligros

No hay información disponible.

Esta sustancia no cumple los criterios de PBT/mPmB recogidos en REACH, Anexo XIII.

Información del alterador del sistema endocrino Contiene un disruptor endocrino conocido o sospechado.

Nombre químico	UE - REACH (1907/2006) - Artículo 59 (1) - Lista de sustancias candidatas de muy alta preocupación (SVHC) para la autorización	UE - REACH (1907/2006) - Lista de sustancias para la evaluación del disruptor endocrino
Octadecane	-	-

SECCIÓN 3: Composición/información sobre los componentes

3.1 Sustancias

Nombre químico	% en peso	Número de registro REACH	EC No (EU Index No)	Clasificación conforme al Reglamento (CE) N° 1272/2008 [CLP]	Límite de concentración específico (LCE)	Factor M	Factor M (largo plazo)
Octadecane 593-45-3	100	-	209-790-3	Asp. Tox. 1 (H304) EUH066			



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Esta ficha de datos de seguridad ha sido elaborada de conformidad con los requisitos de: Reglamento (CE) N° 1907/2006 y Reglamento (CE) N° 1272/2008

Fecha de revisión 15-may.-2023

Número de Revisión 1

DRE-C15710100 - n-Octadecane

Texto completo de las frases H y EUH: ver la sección 16

Estimación de toxicidad aguda
No hay información disponible

Este producto no contiene sustancias candidatas a ser extremadamente preocupantes a una concentración mayor de 0.1% (Reglamento (CE) n° 1907/2006 (REACH), Artículo 59)

SECCIÓN 4: Primeros auxilios

4.1. Descripción de los primeros auxilios

Consejo general	Se necesita atención médica inmediata. Mostrar esta ficha de datos de seguridad al médico de servicio.
Inhalación	La aspiración en los pulmones puede provocar lesiones graves en los pulmones. Si ha dejado de respirar, administrar respiración artificial. Consultar a un médico inmediatamente. Transportar a la víctima al exterior. Evitar el contacto directo con la piel. Utilizar medios de barrera para practicar la reanimación boca a boca. Si respira con dificultad, (personal formado para ello debería) administrar oxígeno. Consultar a un médico inmediatamente. Puede producirse un edema pulmonar retardado.
Contacto con los ojos	Enjuagar bien con abundante agua durante al menos 15 minutos, levantando los párpados superior e inferior. Consultar con un médico.
Contacto con la piel	Lavar la piel con agua y jabón. En caso de irritación de la piel o reacciones alérgicas, llamar a un médico.
Ingestión	PELIGRO DE ASPIRACIÓN EN CASO DE INGESTIÓN - PUEDE ENTRAR EN LOS PULMONES Y PROVOCAR DAÑOS. NO provocar el vómito. Si se producen vómitos espontáneos, mantener la cabeza por debajo de la altura de la cadera para impedir su aspiración. Enjuagarse la boca. Nunca dar nada por boca a una persona inconsciente. Consultar a un médico inmediatamente.
Equipo de protección para el personal de primeros auxilios	Asegurarse de que el personal médico sea consciente de los materiales implicados, tomando precauciones para protegerse a sí mismos y para evitar extender la contaminación. Evitar el contacto directo con la piel. Utilizar medios de barrera para practicar la reanimación boca a boca. Utilizar el equipo de protección individual obligatorio.

4.2. Principales síntomas y efectos, agudos y retardados

Síntomas Dificultades respiratorias. Tos y/o estertores. Mareos.

4.3. Indicación de toda atención médica y de los tratamientos especiales que deban dispensarse inmediatamente

Nota para el personal médico Dado el peligro de aspiración, no se debe inducir el vómito ni realizar un lavado gástrico



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Esta ficha de datos de seguridad ha sido elaborada de conformidad con los requisitos de:
Reglamento (CE) N° 1907/2006 y Reglamento (CE) N° 1272/2008

Fecha de revisión 15-may.-2023

Número de Revisión 1

DRE-C15710100 - n-Octadecane

salvo que el riesgo esté justificado por la presencia de sustancias tóxicas adicionales.

SECCIÓN 5: Medidas de lucha contra incendios

5.1. Medios de extinción

Medios de extinción apropiados Utilizar medidas de extinción adecuadas a las circunstancias locales y al entorno.

Incendio grande PRECAUCIÓN: El uso de agua pulverizada para luchar contra el incendio puede ser inefectivo.

Medios de extinción no apropiados No esparcir el material derramado con chorros de agua a alta presión.

5.2. Peligros específicos derivados de la sustancia o de la mezcla

Peligros específicos que presenta el producto químico No hay información disponible.

5.3. Recomendaciones para el personal de lucha contra incendios

Equipos de protección especial y precauciones para el personal de lucha contra incendios El personal de lucha contra incendios debe utilizar un aparato de respiración autónomo y traje de aproximación de protección completa en la lucha contra incendios. Utilizar equipos de protección personal.

SECCIÓN 6: Medidas en caso de vertido accidental

6.1. Precauciones personales, equipo de protección y procedimientos de emergencia

Precauciones individuales Asegurar una ventilación adecuada. Utilizar el equipo de protección individual obligatorio.

Otros datos Consultar las medidas de protección que se recogen en las secciones 7 y 8.

Para el personal de emergencia Utilizar las medidas de protección personal recomendadas en la sección 8.

6.2. Precauciones relativas al medio ambiente

Precauciones relativas al medio ambiente Para obtener más información ecológica, ver el apartado 12.

6.3. Métodos y material de contención y de limpieza

Métodos de contención Prevenir más fugas o vertidos si se puede hacer de forma segura.

Métodos de limpieza Recoger por medios mecánicos y depositar en recipientes apropiados para su eliminación.

Prevención de peligros secundarios Limpiar bien los objetos y lugares contaminados, observando las normativas medioambientales.



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Esta ficha de datos de seguridad ha sido elaborada de conformidad con los requisitos de: Reglamento (CE) N° 1907/2006 y Reglamento (CE) N° 1272/2008

Fecha de revisión 15-may.-2023

Número de Revisión 1

DRE-C15710100 - n-Octadecane

6.4. Referencia a otras secciones

Referencia a otras secciones Para más información, ver la sección 8. Para más información, ver la sección 13.

SECCIÓN 7: Manipulación y almacenamiento

7.1. Precauciones para una manipulación segura

Recomendaciones para una manipulación sin peligro Asegurar una ventilación adecuada.

Consideraciones generales sobre higiene Evitar el contacto con la piel, los ojos o la ropa. No comer, beber ni fumar durante su utilización. Lavar las manos antes de los descansos y después de la jornada de trabajo. Úsense guantes adecuados y protección para los ojos/la cara.

7.2. Condiciones de almacenamiento seguro, incluidas posibles incompatibilidades

Condiciones de almacenamiento Por favor, consulte el certificado del fabricante para las condiciones especiales de temperatura de transporte y almacenaje. Almacenar solo en el envase original, a menos que se indique lo contrario en el Certificado de Análisis. Mantener los contenedores perfectamente cerrados en un lugar fresco, seco y bien ventilado. Guardar bajo llave. Manténgase fuera del alcance de los niños. Almacenar alejado de otros materiales.

7.3. Usos específicos finales

Medidas de gestión de riesgos (MGR) La información requerida se recoge en esta ficha de datos de seguridad.

SECCIÓN 8: Controles de exposición/protección individual

8.1 Parámetros de control

Límites de exposición

Nombre químico	Luxemburgo	Malta	Países Bajos	Noruega	Polonia
Octadecane 593-45-3	-	-	-	TWA: 40 ppm TWA: 275 mg/m ³ STEL: 60 ppm STEL: 343.75 mg/m ³	-
Nombre químico	Portugal	Rumanía	Eslovaquia	Eslovenia	España
Octadecane 593-45-3	-	TWA: 700 mg/m ³ STEL: 1000 mg/m ³	-	-	-



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Esta ficha de datos de seguridad ha sido elaborada de conformidad con los requisitos de:
Reglamento (CE) N° 1907/2006 y Reglamento (CE) N° 1272/2008

Fecha de revisión 15-may.-2023

Número de Revisión 1

DRE-C15710100 - n-Octadecane

Límites biológicos de exposición ocupacional

Este producto, tal como se suministra, no contiene ningún material peligroso con límites biológicos establecidos por los organismos reguladores regionales específicos

Nivel sin efecto derivado (DNEL) No hay información disponible.
Concentración prevista sin efecto (PNEC) No hay información disponible.

8.2 Controles de la exposición

Equipos de protección personal

Protección de los ojos/la cara Evítense el contacto con los ojos. Utilizar gafas de seguridad con protectores laterales (o antiparras). Si es probable que se produzcan salpicaduras, utilizar gafas de seguridad con protectores laterales.

Protección de las manos Los guantes de protección indicados deben cumplir con las especificaciones de la Directiva 89/686/EEC y con su norma resultante EN374.

Guantes			
Duración del contacto	EPP - Material de los guantes	Espesor de los guantes	Tiempo de paso
	Llevar guantes protectores de nitrilo		

Protección de la piel y el cuerpo Úsese indumentaria protectora adecuada.

Protección respiratoria En las condiciones normales de uso no se requieren equipos de protección Si se exceden los límites de exposición o se experimenta irritación, puede ser necesario ventilar y evacuar.

Consideraciones generales sobre higiene Evitar el contacto con la piel, los ojos o la ropa. No comer, beber ni fumar durante su utilización. Lavar las manos antes de los descansos y después de la jornada de trabajo. Úsense guantes adecuados y protección para los ojos/la cara.

Controles de exposición medioambiental No permitir que se introduzca en ningún tipo de alcantarilla, en el terreno ni en ningún cuerpo de agua.

SECCIÓN 9: Propiedades físicas y químicas

9.1. Información sobre propiedades físicas y químicas básicas



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Esta ficha de datos de seguridad ha sido elaborada de conformidad con los requisitos de: Reglamento (CE) N° 1907/2006 y Reglamento (CE) N° 1272/2008

Fecha de revisión 15-may.-2023

Número de Revisión 1

DRE-C15710100 - n-Octadecane

Estado físico	Sólido
Aspecto	Cristalino Solid with a low melting point
Color	incolore
Olor	No hay información disponible.
Umbral olfativo	No hay información disponible

<u>Propiedad</u>	<u>Valores</u>	<u>Comentarios • Método</u>
Punto de fusión / punto de congelación	28 °C	Ninguno conocido
Punto inicial de ebullición e intervalo de ebullición	316 °C	Ninguno conocido
Inflamabilidad	No hay datos disponibles	Ninguno conocido
Límite de inflamabilidad con el aire		Ninguno conocido
Límite superior de inflamabilidad o de explosividad	No hay datos disponibles	
Límite inferior de inflamabilidad o de explosividad	No hay datos disponibles	
Punto de inflamación	154 °C	Ninguno conocido
Temperatura de autoignición	No hay datos disponibles	Ninguno conocido
Temperatura de descomposición		Ninguno conocido
pH	No hay datos disponibles	Ninguno conocido
pH (como solución acuosa)	No hay datos disponibles	No hay información disponible
Viscosidad cinemática	4.03 mm ² /s	Ninguno conocido
Viscosidad dinámica	No hay datos disponibles	Ninguno conocido
Solubilidad en el agua	No hay datos disponibles	Ninguno conocido
Solubilidad(es)	No hay datos disponibles	Ninguno conocido
Coefficiente de partición	No hay datos disponibles	Ninguno conocido
Presión de vapor	No hay datos disponibles	Ninguno conocido
Densidad relativa	0.78 g/mL	Ninguno conocido
Densidad aparente	No hay datos disponibles	
Densidad de líquido	No hay datos disponibles	
Densidad de vapor relativa	No hay datos disponibles	Ninguno conocido
Características de las partículas		
Tamaño de partícula	No hay información disponible	
Distribución de tamaños de partícula	No hay información disponible	

9.2. Otros datos

Peso molecular	254.5
Fórmula molecular	C18H38

9.2.1. Información con respecto a las clases de peligro físico

No es aplicable

9.2.2. Otras características de seguridad

No hay información disponible

SECCIÓN 10: Estabilidad y reactividad



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Esta ficha de datos de seguridad ha sido elaborada de conformidad con los requisitos de:
Reglamento (CE) N° 1907/2006 y Reglamento (CE) N° 1272/2008

Fecha de revisión 15-may.-2023

Número de Revisión 1

DRE-C15710100 - n-Octadecane

10.1. Reactividad

Reactividad No hay información disponible.

10.2. Estabilidad química

Estabilidad Estable en condiciones normales.

Datos de explosión

Sensibilidad a impactos mecánicos Ninguno/a.

Sensibilidad a descargas estáticas Ninguno/a.

10.3. Posibilidad de reacciones peligrosas

Posibilidad de reacciones peligrosas Ninguno durante un proceso normal.

10.4. Condiciones que deben evitarse

Condiciones que deben evitarse Ninguno conocido, en base a la información facilitada.

10.5. Materiales incompatibles

Materiales incompatibles Ninguno conocido, en base a la información facilitada.

Productos de descomposición peligrosos Ninguno conocido, en base a la información facilitada.

SECCIÓN 11: Información toxicológica

11.1. Información sobre las clases de peligro tal como se definen en el Reglamento (CE) no 1272/2008

Información sobre posibles vías de exposición

Información del producto

Inhalación No hay disponibles datos de ensayo específicos sobre la sustancia o la mezcla. La aspiración en los pulmones puede provocar lesiones graves en los pulmones. Puede provocar edema pulmonar. El edema pulmonar puede ser mortal. Puede provocar irritación del tracto respiratorio.

Contacto con los ojos No hay disponibles datos de ensayo específicos sobre la sustancia o la mezcla. Puede provocar irritación.

Contacto con la piel La exposición repetida puede provocar sequedad o formación de grietas en la piel.



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Esta ficha de datos de seguridad ha sido elaborada de conformidad con los requisitos de:
Reglamento (CE) N° 1907/2006 y Reglamento (CE) N° 1272/2008

Fecha de revisión 15-may.-2023

Número de Revisión 1

DRE-C15710100 - n-Octadecane

Ingestión No hay disponibles datos de ensayo específicos sobre la sustancia o la mezcla. Riesgo de aspiración en caso de ingestión. Puede provocar daño pulmonar en caso de ingestión. La aspiración puede provocar edema pulmonar y neumonitis. Puede ser mortal en caso de ingestión y penetración en las vías respiratorias.

Síntomas relacionados con las características físicas, químicas y toxicológicas

Síntomas Dificultades respiratorias. Tos y/o estertores. Mareos.

Medidas numéricas de toxicidad

No hay información disponible

Toxicidad aguda

Efectos retardados e inmediatos, así como efectos crónicos producidos por una exposición a corto y largo plazo

Corrosión o irritación cutáneas A la vista de los datos disponibles, no se cumplen los criterios de clasificación.

Lesiones oculares graves o irritación ocular No hay información disponible.

Sensibilización respiratoria o cutánea No hay información disponible.

Mutagenicidad en células germinales No hay información disponible.

Carcinogenicidad No hay información disponible.

Toxicidad para la reproducción No hay información disponible.

STOT - exposición única No hay información disponible.

STOT - exposición repetida No hay información disponible.



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Esta ficha de datos de seguridad ha sido elaborada de conformidad con los requisitos de:
Reglamento (CE) N° 1907/2006 y Reglamento (CE) N° 1272/2008

Fecha de revisión 15-may.-2023

Número de Revisión 1

DRE-C15710100 - n-Octadecane

Peligro por aspiración Puede ser mortal en caso de ingestión y penetración en las vías respiratorias.

11.2. Información sobre otros peligros

11.2.1. Propiedades disruptivas endocrinas

Propiedades disruptivas endocrinas No hay información disponible.

11.2.2. Otros datos

Otros efectos adversos No hay información disponible.

SECCIÓN 12: Información Ecológica

12.1. Toxicidad

Ecotoxicidad No se ha investigado completamente el impacto medioambiental de este producto.

12.2. Persistencia y degradabilidad

Persistencia y degradabilidad No hay información disponible.

12.3. Potencial de bioacumulación

Bioacumulación No hay información disponible.

12.4. Movilidad en el suelo

Movilidad en el suelo No hay información disponible.

12.5. Resultados de la valoración PBT y mPmB

Evaluación PBT y mPmB El producto contiene sustancias clasificadas como PBT o mPmB.

Nombre químico	Evaluación PBT y mPmB
Octadecane	La sustancia no es PBT / mPmB

12.6. Propiedades disruptivas endocrinas

Propiedades disruptivas endocrinas No hay información disponible.



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Esta ficha de datos de seguridad ha sido elaborada de conformidad con los requisitos de:
Reglamento (CE) N° 1907/2006 y Reglamento (CE) N° 1272/2008

Fecha de revisión 15-may.-2023

Número de Revisión 1

DRE-C15710100 - n-Octadecane

12.7. Otros efectos adversos

No hay información disponible.

SECCIÓN 13: Consideraciones relativas a la eliminación

13.1. Métodos para el tratamiento de residuos

Restos de residuos/productos sin usar	Eliminar de conformidad con las normativas locales. Evacuar los desechos de conformidad con la legislación medioambiental vigente.
Embalaje contaminado	No volver a utilizar los contenedores vacíos.

SECCIÓN 14: Información relativa al transporte

IATA

14.1 Número ONU o número de identificación	No regulado
14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas	No regulado
14.3 Clase(s) de peligro para el transporte	No regulado
14.4 Grupo de embalaje	No regulado
14.5 Peligros para el medio ambiente	No es aplicable
14.6 Precauciones particulares para los usuarios	
Disposiciones particulares	Ninguno/a

IMDG

14.1 Número ONU o número de identificación	No regulado
14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas	No regulado
14.3 Clase(s) de peligro para el transporte	No regulado
14.4 Grupo de embalaje	No regulado
14.5 Contaminante marino	No es aplicable
14.6 Precauciones particulares para los usuarios	
Disposiciones particulares	Ninguno/a No hay información disponible
14.7 Transporte marítimo a granel según los instrumentos de la OMI	No hay información disponible

RID

14.1 Número ONU o número de identificación	No regulado
14.2 Designación oficial de	No regulado



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Esta ficha de datos de seguridad ha sido elaborada de conformidad con los requisitos de:
Reglamento (CE) N° 1907/2006 y Reglamento (CE) N° 1272/2008

Fecha de revisión 15-may.-2023

Número de Revisión 1

DRE-C15710100 - n-Octadecane

transporte de las Naciones Unidas

14.3 Clase(s) de peligro para el transporte	No regulado
14.4 Grupo de embalaje	No regulado
14.5 Peligros para el medio ambiente	No es aplicable
14.6 Precauciones particulares para los usuarios	
Disposiciones particulares	Ninguno/a

ADR

14.1 Número ONU o número de identificación	No regulado
14.2 Designación oficial de transporte de las Naciones Unidas	No regulado
14.3 Clase(s) de peligro para el transporte	No regulado
14.4 Grupo de embalaje	No regulado
14.5 Peligros para el medio ambiente	No es aplicable
14.6 Precauciones particulares para los usuarios	
Disposiciones particulares	Ninguno/a

SECCIÓN 15: Información reglamentaria

15.1. Reglamentación y legislación en materia de seguridad, salud y medio ambiente específicas para la sustancia o la mezcla

Clase de peligro para el agua (WGK) no peligrosa para el agua (nwg)

Polonia

SDS created according to the following Polish regulation: Act of February 25, 2011 on chemical substances and their mixtures (Journal of Laws of 2018, item 143, as amended). Regulation (EC) No 1907/2006 of the European Parliament and of the Council on the Registration, Evaluation, Authorization and Restriction of Chemicals (REACH), establishing the European Chemicals Agency (EC) as amended. Regulation (EC) No 1272/2008 of the European Parliament and of the Council of 16 December 2008 on classification, labeling and packaging of substances and mixtures, as amended. Regulation of the Minister of Health of 10 August 2012 on the criteria and method of classifying chemical substances and their mixtures (Journal of Laws of 2012, item 1018). Regulation of the Minister of Health of 20 April 2012 on labeling packaging of hazardous substances and mixtures and some mixtures (Journal of Laws of 2012, item 445). Regulation of the Minister of Family, Labor and Social Policy of 12 June 2018 on the maximum allowable concentrations and intensities of factors harmful to health in the work environment (Journal of Laws of 2018, item 1286).



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Esta ficha de datos de seguridad ha sido elaborada de conformidad con los requisitos de: Reglamento (CE) N° 1907/2006 y Reglamento (CE) N° 1272/2008

Fecha de revisión 15-may.-2023

Número de Revisión 1

DRE-C15710100 - n-Octadecane

Announcement of the Minister of Economy, Labor and Social Policy of August 28, 2003 on the publication of the unified text of the Ordinance of the Minister of Labor and Social Policy on general health and safety at work regulations (Journal of Laws of 2003, No. 169, item 1650) . Regulation of the Minister of Health of 30 December 2004 on occupational safety and health related to the presence of chemical agents in the workplace (Journal of Laws of 2005, No. 11, item 86). Act of December 14, 2012 on waste (Journal of Laws of 2013, item 21) Regulation of the Minister of Health of December 30, 2004 on occupational health and safety related to the presence of chemical agents in the workplace (Journal U. of 2005, No. 11, item 86). Waste Act of December 14, 2012 (Journal of Laws of 2013, item 21). Act of 13 June 2013 on the management of packaging and packaging waste, Journal of Laws 2013, item 888). Government statement of September 24, 2002 - European Agreement on the International Carriage of Dangerous Goods by Road (ADR) (Journal of Laws No. 194, item 1629 and Journal of Laws of 2003, No. 207, item 2013 and 2014).

Unión Europea

Tome nota de la Directiva 98/24/CE relativa a la protección de la salud y la seguridad de los trabajadores contra los riesgos relacionados con los agentes químicos durante el trabajo.

Autorizaciones y/o restricciones de uso:

Este producto no contiene sustancias sujetas a autorización (Reglamento (CE) n° 1907/2006 (REACH), Anexo XIV) Este producto no contiene sustancias sujetas a restricción (Reglamento (CE) n° 1907/2006 (REACH), Anexo XVII)

REGLAMENTO (UE) 2019/1148 sobre la comercialización y la utilización de precursores de explosivos

No es aplicable

Contaminantes orgánicos persistentes

No es aplicable

Reglamento (CE) 1005/2009 sobre las sustancias que agotan el ozono (SAO)

No es aplicable

Inventarios internacionales

TSCA

Cumple

DSL/NDL

Contactar con el proveedor para obtener información sobre el estado de cumplimiento del inventario

EINECS/ELINCS

Contactar con el proveedor para obtener información sobre el estado de cumplimiento del inventario

ENCS

Contactar con el proveedor para obtener información sobre el estado de cumplimiento del inventario

IECSC

Contactar con el proveedor para obtener información sobre el estado de cumplimiento del



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Esta ficha de datos de seguridad ha sido elaborada de conformidad con los requisitos de:
Reglamento (CE) N° 1907/2006 y Reglamento (CE) N° 1272/2008

Fecha de revisión 15-may.-2023

Número de Revisión 1

DRE-C15710100 - n-Octadecane

KECL	inventario Contactar con el proveedor para obtener información sobre el estado de cumplimiento del inventario
PICCS	Contactar con el proveedor para obtener información sobre el estado de cumplimiento del inventario
AIIC	Contactar con el proveedor para obtener información sobre el estado de cumplimiento del inventario

Leyenda:

TSCA - Ley de control de sustancias tóxicas (Toxic Substances Control Act) estadounidense, apartado 8(b), Inventario
DSL/NDSL - Lista de sustancias domésticas/no domésticas de Canadá
EINECS/ELINCS - (Inventario europeo de sustancias químicas existentes/Lista europea de sustancias químicas notificadas, European Inventory of Existing Chemical Substances/European List of Notified Chemical Substances)
ENCS - Sustancias químicas existentes y nuevas de Japón
IECSC - Inventario de sustancias químicas existentes de China
KECL - Sustancias químicas existentes y evaluadas de Corea
PICCS - Inventario de productos químicos y sustancias químicas de Filipinas
AICS - Inventario australiano de sustancias químicas (Australian Inventory of Chemical Substances)

15.2. Evaluación de la seguridad química

Informe de seguridad química No es necesario evaluar la seguridad química de esta sustancia

SECCIÓN 16: Otra información

Clave o leyenda de abreviaturas y acrónimos utilizados en la ficha de datos de seguridad

Texto completo de las indicaciones de peligro mencionadas en la Sección 3:
H304 - Puede ser mortal en caso de ingestión y penetración en las vías respiratorias

Leyenda

SEP: Sustancias extremadamente preocupantes para su autorización:

Leyenda SECCIÓN 8: Controles de exposición/protección individual

TWA	TWA (promedio ponderado en el tiempo)	STEL	STEL (Límite de exposición a corto plazo, Short Term Exposure Limit)
Techo	Valor límite máximo	*	Designación de la piel

Procedimiento de clasificación	
Clasificación conforme al Reglamento (CE) N° 1272/2008 [CLP]	Método utilizado
Toxicidad aguda oral	Método de cálculo
Toxicidad aguda cutánea	Método de cálculo
Toxicidad aguda por inhalación - gas	Método de cálculo
Toxicidad aguda por inhalación - vapor	Método de cálculo
Toxicidad por inhalación aguda - polvo/niebla	Método de cálculo



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Esta ficha de datos de seguridad ha sido elaborada de conformidad con los requisitos de:
Reglamento (CE) N° 1907/2006 y Reglamento (CE) N° 1272/2008

Fecha de revisión 15-may.-2023

Número de Revisión 1

DRE-C15710100 - n-Octadecane

Corrosión o irritación cutáneas	Método de cálculo
Lesiones oculares graves o irritación ocular	Método de cálculo
Sensibilización respiratoria	Método de cálculo
Sensibilización cutánea	Método de cálculo
Mutagenicidad	Método de cálculo
Carcinogenicidad	Método de cálculo
Toxicidad para la reproducción	Método de cálculo
STOT - exposición única	Método de cálculo
STOT - exposición repetida	Método de cálculo
Toxicidad acuática aguda	Método de cálculo
Toxicidad acuática crónica	Método de cálculo
Peligro por aspiración	Método de cálculo
Ozono	Método de cálculo

Principales referencias bibliográficas y fuentes de datos utilizadas para compilar la FDS

Agencia de Sustancias Tóxicas y Registro de Enfermedades (ATSDR)
 Agencia para la protección del medio ambiente estadounidense, Base de datos ChemView
 Autoridad Europea de Seguridad Alimentaria (EFSA)
 EPA (Agencia para la protección del medio ambiente)
 Nivel(es) guía de exposición aguda (AEGL, Acute Exposure Guideline Level)
 Agencia para la protección del medio ambiente estadounidense, Ley federal sobre insecticidas, fungicidas y rodenticidas
 Agencia para la protección del medio ambiente estadounidense, Productos químicos de alto volumen de producción
 Revista de investigación en alimentos (Food Research Journal)
 Base de datos de sustancias peligrosas
 Base de Datos Internacional de Información Química Uniforme (IUCLID)
 Clasificación GHS de Japón
 Sistema Nacional de Notificación y Evaluación de Sustancias Químicas Industriales de Australia (NICNAS)
 NIOSH (Instituto Nacional para la Salud y Seguridad Ocupacional, National Institute for Occupational Safety and Health)
 ChemID Plus de la Biblioteca nacional de medicina (NLM CIP)
 Base de datos PubMed de la Biblioteca Nacional de Medicina (PUBMED de la NLM)
 Programa Nacional de Toxicología (NTP)
 Base de datos de información y clasificación de productos químicos de Nueva Zelanda (CCID)
 Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económicos, publicaciones sobre salud, seguridad y medio ambiente
 Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económicos, programa de productos químicos de alto volumen de producción
 Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económicos, ficha de datos de detección
 Organización Mundial de la Salud

Fecha de revisión 15-may.-2023

Esta ficha de datos de seguridad cumple los requisitos del Reglamento (CE) n° 1907/2006

Descargo de responsabilidad

La información en esta hoja de seguridad (H de S) ha sido preparada con el esmero adecuado y es, bajo nuestro mejor conocimiento, cierta. El usuario debe determinar la adecuación de esta información según el uso particular que vaya a dar al material en cuestión, asegurarse que cumple las normativas vigentes y tener en cuenta que pueden surgir otras consideraciones de seguridad en el momento de la manipulación y/o almacenaje. La información en esta hoja de seguridad no contiene todas las propiedades del material suministrado ni es una garantía de las mismas y debe ser utilizada sólo como guía. LGC no garantiza ni representa la información contenida en esta H de S y no debe ser



FICHA DE DATOS DE SEGURIDAD

Esta ficha de datos de seguridad ha sido elaborada de conformidad con los requisitos de:
Reglamento (CE) N° 1907/2006 y Reglamento (CE) N° 1272/2008

Fecha de revisión 15-may.-2023

Número de Revisión 1

DRE-C15710100 - n-Octadecane

considerada responsable de la mayor o menor idoneidad de esta información de acuerdo con las intenciones de uso así como de las consecuencias derivadas de dicho uso. LGC no debe ser tampoco acusada en caso de daños o pérdidas derivados de este uso, ya sean directos o indirectos.

Fin de la ficha de datos de seguridad

