

Seguridad inherente: métodos gráficos

Inherent safety: graphical methods
Sécurité intrinsèque: méthodes graphiques

Autor:

Instituto Nacional de Seguridad,
Salud y Bienestar en el Trabajo (INSSBT)

Elaborado por:

José Joaquín Seral Millán
ASPY PREVENCIÓN S.L.U.

Xavier Guardino Solá
CENTRO NACIONAL DE
CONDICIONES DE TRABAJO. INSSBT

Esta Nota Técnica de Prevención (NTP) es la segunda de una serie dedicada a la utilización de metodologías para la evaluación de la seguridad inherente o intrínseca en las etapas de diseño de plantas químicas, serie iniciada con la NTP 1066. Entre dichas metodologías se encuentran aquellas que expresan los resultados de manera gráfica, en lugar de la forma más comúnmente empleada que es mediante índices de riesgo. Se describe el fundamento de dos de estos métodos gráficos, su alcance, ventajas e inconvenientes, y se desarrolla uno de ellos de manera práctica mediante ejemplos.

Las NTP son guías de buenas prácticas. Sus indicaciones no son obligatorias salvo que estén recogidas en una disposición normativa vigente. A efectos de valorar la pertinencia de las recomendaciones contenidas en una NTP concreta es conveniente tener en cuenta su fecha de edición.

1. INTRODUCCIÓN

Una *ruta de síntesis química* se puede definir como la/s materia/s prima/s y la secuencia de etapas de reacción que los convierte en el/los producto/s deseado/s (Lawrence, 1996). Las etapas iniciales del proyecto (investigación y desarrollo, diseño conceptual) constituyen el momento en el cual se realiza la selección de la ruta de síntesis química y la tecnología del proceso que se emplearán para fabricar el producto deseado. A pesar de la importancia de las elecciones que se lleven a cabo en estas primeras etapas, que condicionarán las sustancias químicas que estarán o puedan estar presentes en la planta, las condiciones de operación del proceso y los riesgos a los que pueden verse expuestos los trabajadores, existen obstáculos a la dedicación y desarrollo en profundidad en estas primeras fases del proyecto, entre ellos (Santamaría y Braña, 1998):

- La tendencia a la elección de tecnologías o procesos ya probados, basada en la creencia de que son “seguros” por el mero hecho de hacer las cosas “como siempre se han hecho”.
- El peso histórico que los aspectos económicos han tenido tradicionalmente en la elección; la búsqueda del proyecto más barato posible para conseguir que se lleve a cabo en la planta propia (y no en otras, como ocurre en grupos multinacionales).
- Las premuras de tiempo para poner en marcha las siguientes fases cuanto antes (diagramas de flujo, P&ID, ingeniería de detalle, construcción, puesta en marcha, etc.), lo que incita a dedicar un tiempo escaso a estas primeras fases del proyecto, consideradas a menudo un “mero trámite”.

Es en estas etapas cuando se tienen las mayores posibilidades de incorporar los principios de seguridad inherente al proyecto y de realizar cuantas modificaciones, elecciones y cambios se consideren necesarios.

2. MÉTODOS GRÁFICOS PARA LA EVALUACIÓN DE LA SEGURIDAD INHERENTE

El inconveniente que supone la escasez de información con que se cuenta en las etapas iniciales del proyecto, hace preciso disponer de metodologías que permitan realizar una comparación entre las diferentes opciones a partir de datos que puedan obtenerse de forma más o menos sencilla. Incluso puede suceder que los únicos datos de que se dispone sean los correspondientes a la/s propia/s reacción/es química/s en sí y las sustancias intervinientes en ella/s. Además, metodologías muy complejas en su aplicación o que conlleven un aprendizaje previo de gran dedicación, suelen ser rechazadas de antemano por prevenciónistas, ingenieros y directivos.

En la actualidad existen muchas metodologías para la evaluación de la seguridad inherente, la mayoría de las cuáles se basan en *índices de riesgo*, es decir, proporcionan un valor numérico final (resultado) que permite establecer una clasificación (*ranking*) de las rutas de síntesis química (o procesos, según el caso) que se están valorando, con el objetivo de seleccionar aquella inherentemente más segura. No obstante, existen algunas metodologías que, en lugar de expresar el resultado como un índice de riesgo, proponen una valoración de las alternativas disponibles a través de la representación gráfica de varios parámetros para que, a continuación, se realice la evaluación en base a la información objetiva de los gráficos y la experiencia y conocimientos de quienes aplican la metodología. Esto resulta especialmente útil para poder comparar las diferencias entre las distintas opciones, en lugar de comparar una posición en un *ranking*. En definitiva, a través de un método gráfico se pueden observar más fácilmente las variaciones que experimentan los parámetros entre unas rutas y otras.

Entre los métodos gráficos desarrollados en las últimas décadas se encuentran los siguientes:

- *Método gráfico de J.P. Gupta y D.W. Edwards (2003)*. Se trata de un método que parte del índice PIIS (*Prototype Index of Inherent Safety*), índice desarrollado por D.W. Edwards y D. Lawrence, en el que los parámetros escogidos se representan de forma gráfica. Al igual que el índice PIIS, es un método dirigido a la selección de la ruta de síntesis química inherentemente más segura, dejando sin valorar otros aspectos del proceso.
- *Método gráfico de M.H. Hassim, M. Hurme et al. (2013)*. Este método, que parte del índice IOHI (*Inherent Occupational Health Index*) desarrollado por M.H. Hassim y M. Hurme, está dirigido a la selección de la mejor ruta de síntesis química de entre varias alternativas, pero con un enfoque hacia la Higiene Industrial y la Salud Ocupacional, empleando para ello 4 parámetros en la representación gráfica: modo en el que tiene lugar el proceso (continuo, semicontinuo o discontinuo), tendencia a pasar al ambiente (para los líquidos la volatilidad se valora en función de su punto de ebullición; para los sólidos, la valoración se realiza en función de su forma de presentación), presión de operación (expresada en bar) y peligros para la salud (*Health Hazards*). La presión se representa en la gráfica tal cual, expresada en bar, mientras que los otros tres parámetros se representan en función de las puntuaciones obtenidas en las tablas correspondientes del índice IOHI.

El parámetro *Health Hazards* se obtiene a partir de la suma de las puntuaciones de las tablas obtenidas para dos factores: el primero vinculado al *Occupational Exposure Limit OEL* (para sólidos, en unidades de mg/m³; para gases y vapores, en ppm) y el segundo a las frases R. A pesar de que el método original hace referencia a las frases R, debe hacerse constar que éstas han sido reemplazadas por las indicaciones de peligro H, que son las actualmente vigentes por el Reglamento CLP. La forma de obtener la puntuación final de las tablas para tres de las variables del método (la tendencia a pasar al ambiente, el OEL y las frases R), para cada etapa de una ruta de síntesis, es la siguiente: la puntuación final escogida de las tablas será la correspondiente al caso más desfavorable considerando a todas las sustancias químicas que intervienen en esa etapa (es decir, se toma la mayor puntuación proporcionada por las sustancias químicas de esa etapa)

Finalmente, los cuatro parámetros son representados en la gráfica, de manera individual, para cada una de las etapas de cada una de las rutas de síntesis. Una vez se dispone de la representación gráfica completa de todas las alternativas, es decir, de todas las rutas de síntesis, corresponde al prevencionista realizar la evaluación teniendo en cuenta qué valores numéricos más altos de los parámetros indican mayor nivel de riesgo.

Ambos métodos son muy similares en su desarrollo práctico, son sencillos de aplicar y ofrecen una comparación de los parámetros evaluados entre las diferentes rutas de síntesis en estudio. Sin embargo, estos métodos gráficos presentan algunos inconvenientes, entre ellos:

- Los parámetros representados en la gráfica son pocos; para facilitar la aplicación del método y su sencillez, lo cual tiene el efecto colateral de que se pierde la información que proporcionan otras variables que no están representadas. La elección de los parámetros

que se utilizan depende del criterio de los autores de la metodología, aunque en ambos métodos se consultó a expertos, invitándoles a realizar comentarios y a poner de manifiesto aquellos que consideraban como los más relevantes.

- Algunos parámetros están representados como tales (por ejemplo, la presión se representa a través del valor numérico que ésta tenga para esa ruta de síntesis, expresada en unas unidades determinadas, como podría ser «9 bar»). Sin embargo, otros parámetros se representan de acuerdo a una puntuación, la cual está basada en tablas donde la puntuación se asigna por intervalos, lo que provoca que el «salto de puntuación» entre un intervalo y el siguiente sea brusco, además del hecho de que el valor de las puntuaciones y el tamaño de los intervalos dependen del criterio del autor de la metodología.
- Los métodos gráficos suelen estar enfocados a la selección de la ruta de síntesis inherentemente más segura, centrándose en las reacciones químicas y las sustancias que en ellas intervienen, por lo que dejan sin valorar otros aspectos del proceso (tecnología, equipos empleados, etc.).
- En la representación gráfica se tienen en cuenta únicamente las etapas que corresponden a reacciones químicas y, generalmente, sólo se dibujan las etapas de reacción que conducen a la obtención del producto/s deseado/s (no considerándose las reacciones químicas paralelas o no deseadas).

En la línea de lo expuesto en la NTP 1066, puede suceder que los resultados del gráfico muestren dos rutas de síntesis química como las mejores opciones (las inherentemente más seguras), pero que cada una de ellas presente sus particularidades. Por ejemplo, al aplicar el método de Gupta y Edwards, podría suceder que una opción sea inherentemente más segura respecto a la temperatura, mientras que la otra sea inherentemente más segura respecto a la inflamabilidad de las sustancias químicas empleadas. Las estrategias para eliminar o reducir los riesgos requerirán actuar de forma diferente en cada caso.

En resumen, los métodos gráficos pueden ser de gran utilidad, dada su sencillez y facilidad de aplicación práctica, para la selección de aquellas rutas de síntesis inherentemente más seguras entre las alternativas valoradas.

3. MÉTODO GRÁFICO DE J.P. GUPTA Y D.W. EDWARDS (2003)

En este método se realiza la representación gráfica de tres parámetros: presión, temperatura y FET. El parámetro FET, adimensional, engloba a su vez a tres variables: inflamabilidad (*flammability*), explosividad (*explosiveness*) y toxicidad (*toxicity*).

Para cada etapa de las diferentes rutas de síntesis se dibujan en el gráfico los tres parámetros. La presión y la temperatura se representan según el valor que tengan en esa etapa de la ruta de síntesis, manteniendo las mismas unidades (por ejemplo, representando siempre la presión en atmósferas y la temperatura en grados centígrados). Si esa etapa de la ruta de síntesis presenta un rango de temperatura y/o un rango de presión en el que puede llevarse a cabo, se representa el caso más desfavorable, es decir, el valor numérico mayor. Por ejemplo, según se muestra en la Tabla 4, en la ruta 1, correspondiente a la ruta de síntesis de ácido acético a partir de la oxidación de metano y posterior carbonila-

ción de metanol, para la primera etapa, se tomará una temperatura de 500 °C y una presión de 100 atmósferas para la representación gráfica, mientras que para la segunda etapa se tomará una temperatura de 250 °C y una presión de 1,5 atmósferas.

El parámetro FET se obtiene a partir de la suma de las puntuaciones obtenidas para la inflamabilidad, la explosividad y la toxicidad, en las tablas correspondientes de la tesis doctoral de D. Lawrence (1996), reproducidas respectivamente en las tablas 1, 2 y 3. Las puntuaciones de inflamabilidad están basadas en el punto de destello (*flash point*) y en el punto de ebullición (*boiling point*), expresados en grados centígrados. Las puntuaciones de explosividad están basadas en el valor de la diferencia entre el límite superior de inflamabilidad (LSE) y el límite inferior de inflamabilidad (LIE), expresados ambos en porcentaje (%) en volumen en aire. Las puntuaciones de toxicidad están basadas en el método original en el TLV (*Threshold Limit Value*) al cual un trabajador puede estar expuesto (8 horas diarias, 5 días a la semana), expresado en partes por millón. En relación a la "toxicidad" deben hacerse unas aclaraciones importantes:

S = (LSE - LIE) % vol.	Puntuación
0 ≤ S < 10	1
10 ≤ S < 20	2
20 ≤ S < 30	3
30 ≤ S < 40	4
40 ≤ S < 50	5
50 ≤ S < 60	6
60 ≤ S < 70	7
70 ≤ S < 80	8
80 ≤ S < 90	9
90 ≤ S < 100	10

Tabla 1. Puntuaciones de Explosividad.

TLV (ppm)	Puntuación
TLV < 0,001	8
0,001 ≤ TLV < 0,01	7
0,01 ≤ TLV < 0,1	6
0,1 ≤ TLV < 1,0	5
1,0 ≤ TLV < 10,0	4
10,0 ≤ TLV < 100,0	3
100,0 ≤ TLV < 1000,0	2
1000,0 ≤ TLV < 10000,0	1
10000,0 ≤ TLV	0

Tabla 2. Puntuaciones de peligrosidad para la salud.

F.P. = Flash Point B.P. = Boiling Point	Puntuación
No inflamable.	0
FP > 60 °C	1
37,7 °C < FP < 60 °C	2
FP < 37,7 °C BP > 37,7 °C	3
FP < 37,7 °C BP < 37,7 °C	4

Tabla 3. Puntuaciones de Inflamabilidad.

- A pesar de que en el método original se habla de los TLV, en España el criterio viene dado por los LEP (Límites de Exposición Profesional) incluidos en el documento "Límites de exposición Profesional para Agentes Químicos en España" que se publica por el INSHT con periodicidad anual. En concreto para este método, el VLA-ED (Valor Límite Ambiental de Exposición Diaria).
- En el método original se emplea el término toxicidad (*toxicity*) pero debería emplearse la denominación "peligrosidad para la salud" (*health hazard*). En términos formales, los TLV o LEP no son una medida de la toxicidad sino de la peligrosidad para la salud: de hecho, que una sustancia tenga un valor menor que otra no significa necesariamente que será más tóxica, sino que puede ser por un tema de capacidad irritativa, olor u otro tipo de efecto. Por ello, en este texto y en adelante se empleará esta denominación.

Para cada etapa de cada ruta de síntesis, el valor del parámetro FET que se representa en el gráfico es la suma de las mayores puntuaciones de inflamabilidad, explosividad y peligrosidad para la salud (casos más desfavorables) considerando a todas las sustancias químicas que intervienen en esa etapa. En algunos casos puede suceder que la misma sustancia química presente los mayores valores de inflamabilidad, explosividad y peligrosidad para la salud, simultáneamente, de esa etapa de la ruta de síntesis (o de la propia ruta, si ésta consta de una sola etapa). En otros casos, no será así, y para calcular el parámetro FET deberá sumarse la puntuación de la sustancia más inflamable, la de la sustancia con peores características de explosividad y la de la sustancia más peligrosa para la salud (casos más desfavorables) en esa etapa de la ruta de síntesis.

Para el caso concreto de la valoración de la peligrosidad para la salud, debe hacerse una indicación importante en relación a los asfixiantes simples, como por ejemplo el nitrógeno, el hidrógeno y otros gases y vapores que, presentes en el aire, actúan desplazando al oxígeno y disminuyendo la concentración de éste en el aire: estas sustancias pueden no tener asignado un LEP y el único factor limitador de concentración viene dado por el oxígeno disponible en el aire (usualmente, una atmósfera con una concentración de oxígeno inferior al 19,5 % en volumen en aire se considera deficiente en oxígeno). En estos casos, siguiendo el criterio expuesto en su tesis por D. Lawrence, se asigna una puntuación de valor uno para la peligrosidad para la salud.

Las diferentes rutas de síntesis química se representan una tras otra en el eje de abscisas, de izquierda a derecha. De igual modo, las etapas que constituyen cada ruta de síntesis concreta se representan, secuencialmente, de izquierda a derecha. En la representación gráfica, como ya se ha comentado, se tienen en cuenta únicamente las etapas que corresponden a reacciones y, generalmente, sólo se dibujan las etapas de reacción que conducen a la obtención del producto/s deseado/s.

Finalmente, los tres parámetros (presión, temperatura y FET) se dibujan en la gráfica, de manera individual, para cada una de las etapas de cada una de las rutas de síntesis. Una vez se dispone de la representación gráfica completa de todas las alternativas, es decir, de todas las rutas de síntesis y sus etapas, corresponde al preventivo realizar la evaluación teniendo en cuenta que valores numéricos más altos de los parámetros indican mayor nivel de riesgo.

A continuación se muestran dos ejemplos de aplicación del método.

Ejemplo 1. Síntesis de ácido acético

En la tabla 4 se muestran tres alternativas para la síntesis de ácido acético. Obsérvese que la primera ruta de síntesis consta de dos etapas, por lo que cada una de ellas ha de ser representada por separado en la gráfica. En la tabla 5 se muestran las propiedades de las sustancias químicas implicadas y en la tabla 6 se muestran las puntuaciones de explosividad, peligrosidad para la salud

e inflamabilidad para cada una de ellas. En la tabla 7 se muestra el valor calculado del parámetro FET. Finalmente, en la Figura 1 se muestra la representación gráfica: obsérvese que en la etapa 1 de la ruta 1, la presión (100 atmósferas) se sale del rango que muestra la gráfica, por lo que ha sido representada de manera simbólica.

Puede observarse que la ruta 1 es la menos segura de todas y que la ruta 3, correspondiente a la oxidación de etanol, es la ruta inherentemente más segura.

<p>Ruta 1: Oxidación de metano y carbonilación de metanol.</p> <ul style="list-style-type: none"> Etapa 1: Metano + Oxígeno → Metanol + Monóxido de carbono + Agua. $2 \text{CH}_4 + 2 \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{OH} + \text{CO} + 2 \text{H}_2\text{O}$. Temperatura: 350 - 500 °C. Presión: 60 - 100 atm. Etapa 2: Metanol + Monóxido de carbono → Ácido acético. $\text{CH}_3\text{OH} + \text{CO} \rightarrow \text{CH}_3\text{COOH}$. Temperatura: 150 - 250 °C. Presión: 1 - 1,5 atm.
<p>Ruta 2: Oxidación de etileno. $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{COOH}$ Etileno + Oxígeno → Ácido acético. Temperatura: 150 °C. Presión: 4,5 atm.</p>
<p>Ruta 3: Oxidación de etanol. $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{COOH} + \text{H}_2\text{O}$ Etanol + Oxígeno → Ácido acético + Agua. Temperatura: 60 - 115 °C. Presión: 1 - 4 atm.</p>

Tabla 4. Detalles de tres rutas para la síntesis de ácido acético (Fuente: C. Palaniappan et al., 2004).

	Ácido acético	Etanol	Metano	Etileno	Metanol	Monóxido de carbono
LSE (% vol)	19,9	19	15,0	36	36,5	74,2
LIE (% vol)	4	3,3	5,0	2,7	6,0	12,5
LEP (ppm)	10 (* (** (**))	1000 (**)	Asfixiante	200 (***)	200 (* (** (**))	25 (* (** (**))
F.P. (°C)	39,4	12,8	Gas	Gas	11,1	Gas
B.P. (°C)	117,7	78,3	- 161,1	- 103,8	63,8	- 191,6
(*) ACGIH (2016), TLV-TWA (8 horas). Fuente: https://www.osha.gov/dsg/annotated-pels/tablez-1.html (**) OSHA, PEL-TWA (8 horas). Fuente: https://www.osha.gov/dsg/annotated-pels/tablez-1.html (***) INSHT (2016), VLA-ED (8 horas). Fuente: http://www.insht.es						

Tabla 5. Propiedades de las sustancias químicas implicadas (excepto el agua y el oxígeno).

	Ácido acético	Etanol	Metano	Etileno	Metanol	Monóxido de carbono
Explosividad	2	2	2	4	4	7
Peligrosidad para la salud	3	1	1	2	2	3
Inflamabilidad	2	3	4	4	3	4

Tabla 6. Puntuaciones de las sustancias químicas implicadas (excepto el agua y el oxígeno).

	FET
Ruta 1. Etapa 1.	7 + 3 + 4 = 14
Ruta 1. Etapa 2.	7 + 3 + 4 = 14
Ruta 2.	4 + 3 + 4 = 11
Ruta 3.	2 + 3 + 3 = 8

Tabla 7. Cálculo del parámetro FET para cada ruta y etapa de síntesis.

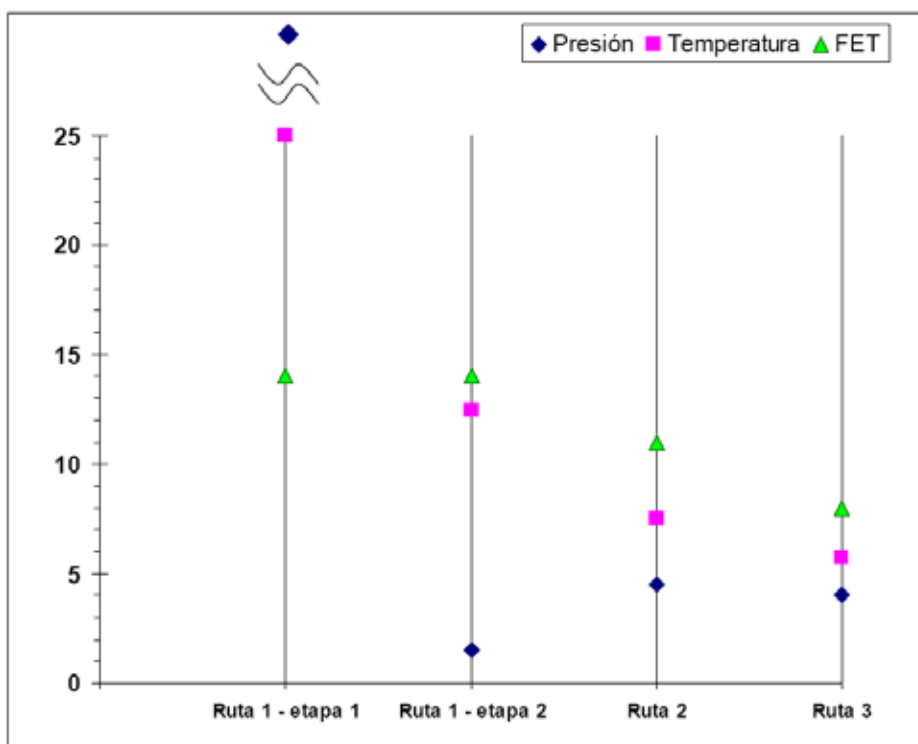


Figura 1. Representación gráfica de las rutas de síntesis de ácido acético. Los valores de temperatura que se han representado en la gráfica son los correspondientes a cada etapa/ruta, en grados centígrados, divididos por veinte. Las unidades de la presión son atmósferas.

Ejemplo 2. Síntesis de acetato de etilo

En la tabla 8 se muestran cuatro alternativas para la síntesis de acetato de etilo. Obsérvese que la reacción química de la primera ruta de síntesis es un equilibrio. En la tabla 9 se muestran las propiedades de las sustancias químicas implicadas y en la tabla 10 se muestran las puntuaciones de explosividad, peligrosidad para la salud e inflamabilidad para cada una de ellas. En la tabla 11 se muestra el valor calculado del parámetro FET. Finalmente, en la Figura 2 se muestra la representación gráfica.

Puede observarse que la ruta 1 y la ruta 3 son, claramente, rutas de síntesis inherentemente más seguras que las rutas 2 y 4. La ruta 1 y la ruta 3 tienen lugar a presión atmosférica pero, mientras que la ruta 1 requiere de mayor temperatura (70 °C frente a 5 °C de la ruta 3), la ruta 3 presenta un valor del parámetro FET cuatro puntos superior al de la ruta 1. Haciendo un desglose de las sustancias químicas implicadas en estas dos rutas, el acetaldehído (ruta 3) presenta las peores caracterís-

ticas de explosividad e inflamabilidad, mientras que el ácido acético (ruta 1) es la sustancia más peligrosa para la salud. Por consiguiente, teniendo en cuenta que una temperatura de 70 °C no es una temperatura de operación elevada (de hecho, según el criterio de D. Lawrence ambas rutas tendrían, respecto a la temperatura, la misma puntuación) y sin valorar otros factores que no sean los que utiliza este método (calores de reacción, inventario, conversión, rendimiento, reacciones paralelas o no deseadas, etc.), la esterificación (ruta 1) parece ser la ruta de síntesis inherentemente más segura.

El método no valora otros aspectos del proceso que no sean las condiciones de operación de la ruta de síntesis y la peligrosidad de las sustancias implicadas en ella. Al respecto de la tecnología y los equipos de proceso, continuando en la línea de implementación de los principios de la seguridad inherente, en el caso concreto de la esterificación (ruta 1) cabe citar a la *destilación reactiva* y las *tecnologías de membrana*, ambas relacionadas a su vez con la *intensificación de procesos*. La destilación

<p>Ruta 1: Esterificación de Fischer. $\text{CH}_3\text{COOH} + \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{COOCH}_2\text{CH}_3 + \text{H}_2\text{O}$ Ácido acético + Etanol → Acetato de Etilo + Agua. Temperatura: 70 °C. Presión: 1 atm.</p>
<p>Ruta 2: Dehidrogenación de etanol. $2 \text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{COOCH}_2\text{CH}_3 + 2 \text{H}_2$ Etanol → Acetato de Etilo + Hidrógeno. Temperatura: 245 °C. Presión: 15 atm.</p>
<p>Ruta 3: Condensación o dimerización de acetaldehído. $2 \text{CH}_3\text{COH} \rightarrow \text{CH}_3\text{COOCH}_2\text{CH}_3$ Acetaldehído → Acetato de Etilo. Temperatura: 5 °C. Presión: 1 atm.</p>
<p>Ruta 4: Adición directa de etileno y ácido acético. $\text{C}_2\text{H}_4 + \text{CH}_3\text{COOH} \rightarrow \text{CH}_3\text{COOCH}_2\text{CH}_3$ Etileno + Ácido acético → Acetato de Etilo. Temperatura: 195 °C. Presión: 16 atm.</p>

Tabla 8. Detalles de cuatro rutas para la síntesis de acetato de etilo (Fuente: J. Serna et. al, 2016).

	Ácido acético	Etanol	Acetaldehído	Etileno	Acetato de etilo	Hidrógeno
LSE (% vol)	19,9	19	60	36	11,5	76
LIE (% vol)	4	3,3	4	2,7	2	4
LEP (ppm)	10 (*) (**) (***)	1000 (**)	200 (**)	200 (***)	400 (*) (**) (***)	Asfixiante
F.P. (°C)	39,4	12,8	- 37,7	Gas	- 4,4	Gas
B.P. (°C)	117,7	78,3	20,5	- 103,8	77,2	- 252,7

(*) ACGIH (2016), TLV-TWA (8 horas). Fuente: <https://www.osha.gov/dsg/annotated-pels/tablez-1.html>
(**) OSHA, PEL-TWA (8 horas). Fuente: <https://www.osha.gov/dsg/annotated-pels/tablez-1.html>
(***) INSHT (2016), VLA-ED (8 horas). Fuente: <http://www.insht.es>

Tabla 9. Propiedades de las sustancias químicas implicadas (excepto el agua).

	Ácido acético	Etanol	Acetaldehído	Etileno	Acetato de etilo	Hidrógeno
Explosividad	2	2	6	4	1	8
Peligrosidad para la salud	3	1	2	2	2	1
Inflamabilidad	2	3	4	4	3	4

Tabla 10. Puntuaciones de las sustancias químicas implicadas (excepto el agua).

	FET
Ruta 1	$2 + 3 + 3 = 8$
Ruta 2	$8 + 2 + 4 = 14$
Ruta 3	$6 + 2 + 4 = 12$
Ruta 4	$4 + 3 + 4 = 11$

Tabla 11. Cálculo del parámetro FET para cada ruta de síntesis.

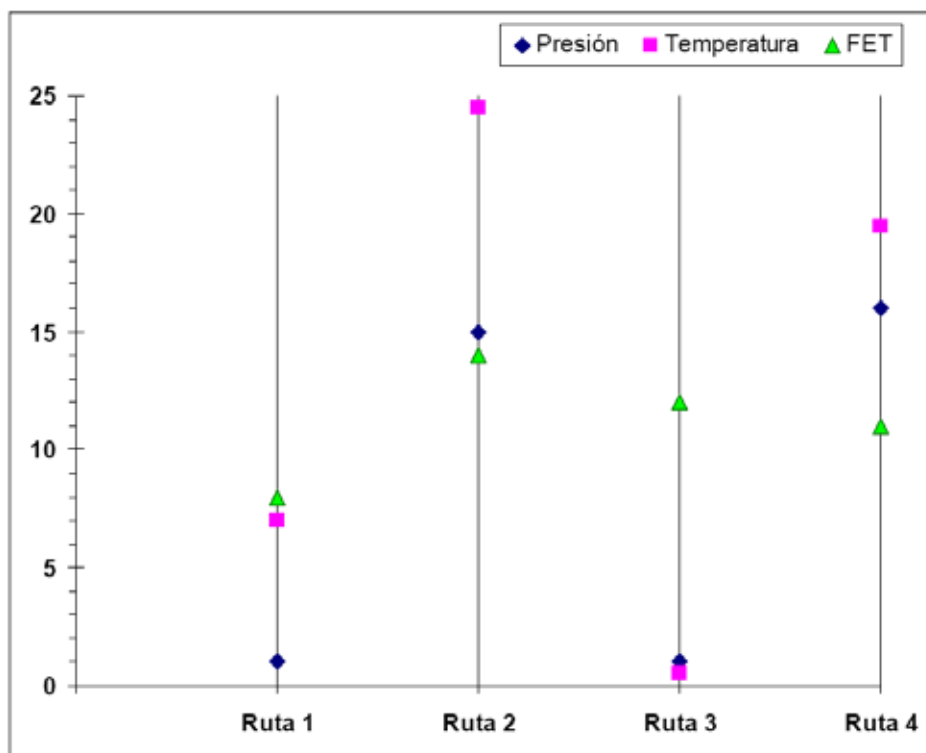


Figura 2. Representación gráfica de las rutas de síntesis de acetato de etilo. Los valores de temperatura que se han representado en la gráfica son los correspondientes a cada ruta, en grados centígrados, divididos por diez. Las unidades de la presión son atmósferas.

reactiva permite simplificar el proceso (menor número de equipos) al llevar a cabo reacción y separación en un mismo equipo, facilitando al mismo tiempo el desplazamiento del equilibrio (recuérdense los principios de Le Chatelier). Por su parte, M.P. Bernal et al. (2002), utilizaron un reactor de membrana zeolítica activa (la zeolita H-ZSM-5 actúa como catalizador de la esterificación del etanol con ácido acético) para acoplar reacción y separación a nivel microscópico de manera eficiente, logrando mayores conversiones que un reactor de lecho fijo convencional y que un reactor de membrana zeolítica no activa (donde ésta se mantiene separada del catalizador).

4. CONCLUSIONES FINALES

Los métodos gráficos son metodologías sencillas que permiten una evaluación de la seguridad inherente en las etapas iniciales del proyecto de diseño de una planta química. La información que proporcionan, a través de una representación gráfica, mostrando varios parámetros y comparando la variación de éstos entre unas rutas y otras, puede ser útil para alcanzar el objetivo de seleccionar las rutas de síntesis química inherentemente más seguras, que impliquen sustancias químicas menos peligrosas y condiciones de operación más moderadas.

BIBLIOGRAFÍA

BERNAL, M.P.; CORONAS, J.; MENÉNDEZ, M.; SANTAMARÍA, J.

Coupling of reaction and separation at the microscopic level: esterification processes in an H-ZSM-5 membrane reactor: *Chemical Engineering Science*. 57, 1557-1562, 2002. [Consulta: 27 de diciembre de 2016].

Disponible en: https://www.researchgate.net/publication/223281839_Coupling_of_Reaction_and_Separation_at_the_Microscopic_Level_Esterification_Processes_in_a_H-ZSM-5_Membrane_Reactor

GUPTA, J.P.; EDWARDS, D.W.

A simple graphical method for measuring inherent safety: *Journal of Hazardous Materials*. 104, 15-30, 2003.

HASSIM, M.H.; HURME, M.

Inherent occupational health assessment during process research and development stage: *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. 23, 127-138, 2010.

[Consulta: 27 de diciembre de 2016]. Disponible en: <http://lib.tkk.fi/Diss/2010/isbn9789526030951/article2.pdf>

HASSIM, M.H.; HURME, M.; EDWARDS, D.W.; AZIZ, N.N.N.A.; RAHIM, F.L.M.

Simple graphical method for inherent occupational health assessment: *Process Safety and Environmental Protection*. 91, 438-451, 2013.

[Consulta: 27 de diciembre de 2016]. Disponible en: https://www.researchgate.net/profile/Mimi_Hassim/publication/283237276_A_graphical_method_for_assessing_inherent_safety_during_research_and_development_phase_of_process_design/links/56ef664808ae4b8b5e756e3b.pdf?origin=publication_list

LAWRENCE, D.

Quantifying inherent safety of chemical process routes. Loughborough: Submitted in partial fulfilment of the requirements for the award of Degree of Doctor of Philosophy of the Loughborough University of Technology, 1996.

[Consulta: 27 de diciembre de 2016]. Disponible en: <https://dspace.lboro.ac.uk/dspace-jspui/bitstream/2134/7427/3/16403.pdf>

PALANIAPPAN, C.; SRINIVASAN, R.; TAN, R.

Selection of inherently safer process routes: a case study: *Chemical Engineering and Processing*. 2004, Vol. 43, 647-653.

[Consulta: 27 de diciembre de 2016]. Disponible en: <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.566.3150&rep=rep1&type=pdf>

SANTAMARÍA, J.M.; BRAÑA, P.A.

Análisis y reducción de riesgos en la industria química. 2ª edición.

Madrid: Fundación MAPFRE, 1998.

SERNA, J.; DÍAZ, E.N.; NARVÁEZ, P.C.; CAMARGO, M.; GÁLVEZ, D.; ORJUELA, A.

Multi-criteria decision analysis for the selection of sustainable chemical process routes during early design stages: *Chemical Engineering Research and Design*. 113, 28-49, 2016.

