



CAPROLACTAM
Caprolactam Industries

2013

Planta para la producción de **Caprolactama**



UAB
Universitat Autònoma de Barcelona

Jordi Aguilar Garrido

Albert Enrique Amores

Antonio Jiménez Rodríguez

Ricard Noy Orcau

Patricia Quintero Ibáñez

Rafael Torres Silva

Tutor: Carles Solà i Ferrando

11. MANUAL DE CÁLCULOS

1. CONTENIDO

11. Manual de cálculos	2
11.1. TANQUES DE ALMACENAMIENTO	1
11.1.1. ALMACENAMIENTO DE MATERIAS PRIMERAS: AMONÍACO ANHIDRO (T-101 Y T-102)	7
11.1.2. ALMACENAMIENTO DE MATERIAS PRIMERAS: CICLOHEXANONA (T-103 A T-105)	24
11.1.3. ALMACENAMIENTO DE MATERIAS PRIMERAS: PERÓXIDO DE HIDRÓGENO (T-106 Y T-107)	38
11.1.4. ALMACENAMIENTO DEL AGENTE EXTRACTOR: TOLUENO (T-108) ...	46
11.1.5. ALMACENAMIENTO DE MATERIAS PRIMERAS: TERC-BUTANOI.....	55
11.1.6. ALMACENAMIENTO DE MATERIAS PRIMERAS: ÓLEUM (T-110 A T-112)	69
11.1.7. ALMACENAMIENTO DEL AGENTE EXTRACTOR: BENCENO (T-113)	77
11.1.8. ALMACENAMIENTO DEL SUBPRODUCTO: SULFATO AMÓNICO (T-701 A T-705)	86
11.1.9. ALMACENAMIENTO DEL PRODUCTO: E-CAPROLACTAMA (T-706 A T-709)	98
11.2. REACTORES	105
11.2.1. REACTOR DE AMOXIMACIÓN: R-201	
105	
11.2.2. REACCIÓN DE TRANSPOSICIÓN DE BECKMANN (“BECKMANN REARRANGEMENT”)	139
11.2.3. REACTOR DE NEUTRALIZACIÓN DE ÁCIDO SULFÚRICO (R-401)	
152	

11.3. COLUMNAS	182
11.3.1. COLUMNAS DE DESTILACIÓN (C-201/C-202)	182
11.3.2. COLUMNAS DE EXTRACCIÓN (C-203).....	203
11.3.3.Columnas de destilación	C-204 / C-205211
11.3.6. COLUMNAS DE DESTILACIÓN C-502 y C-503	229
11.4. SEPARADORES DE FASES	236
11.4.1. Separador S-201	236
11.4.1.1.Introducción.....	236
11.4.2. Separador S-401	243
11.4.2.1Introducción	243
1.4.3. Separador S-501.....	261
11.5. Purificación del sulfato de amonio	264
11.5.1.Alterativas de purificación	264
11.5.2.DTB-601 y DTB-602	271
11.6. TANQUES DE MEZCLA Y TANQUES DE PROCESO.....	277
11.6.1. TANQUE DE MEZCLA (T-201).....	277
11.6.2. Peso del cuerpo cilíndrico del tanque.....	285
11.6.3 TANQUES DE PROCESO PARA HACER EL VACÍO (T-202 Y T-203)	290
11.6.4TANQUES DE PROCESO PARA HACER EL VACÍO (T-204 Y T-205).....	293
11.6.5TANQUE DE PROCESO O TANQUE ACUMULADOR (T-304).....	297
11.6.6 TANQUE DE MEZCLA (T-401)	301
11.6.7TANQUES DE PROCESO O TANQUES ACUMULADORES (T-501 Y T-502)	
.....	305
11.6.8TANQUES DE PROCESO PARA HACER EL VACÍO (T-504 Y T-505)	

11.6.9 TANQUE DE PROCESO O TANQUE ACUMULADOR (T-503)

313

11.7 INTERCAMBIADORES DE CALOR 317

11.8. TUBERÍAS 326

11.8.1. Cálculo del diámetro interno de la tubería

326

11.9. EQUIPOS DE IMPULSIÓN DE FLUIDOS 330

11.9.1.....Bombas

330

11.10 ESCAMADORA ES-501 339

11.10.1. Introducción 339

11.10.2. Diseño general de la escamadora E-501 339



11.1. TANQUES DE ALMACENAMIENTO

Antes de empezar a diseñar cada uno de los tanques de almacenamiento se cree necesario aclarar ciertos conceptos previos, explicar los tipos de tanques existentes y también remarcar ciertos aspectos que son necesarios tener presente a lo largo de todo el diseño.

- CONCEPTOS PREVIOS:

- Depósito: Recipiente diseñado para soportar una presión interna manométrica superior a 98 kPa (1 kg/cm²).
- Tanque: Recipiente diseñado para soportar una presión interna manométrica no superior a 98 kPa (1 kg/cm²).
- Tanque atmosférico: Recipiente diseñado para soportar una presión interna manométrica de hasta 15 kPa (0,15 kg/ cm²). No se utilizarán para almacenamiento de líquidos a su temperatura de ebullición o superior.
- Tanque a baja presión: Recipiente diseñado para soportar una presión interna manométrica superior a 15 kPa (0,15 kg/ cm²) y no superior a 98 kPa (1 kg/cm²).
- Tanque de techo flotante: Recipiente con o sin techo fijo que lleva una doble pared horizontal flotante o una cubierta metálica soportada por flotadores metálicos estancos. Éstos pueden mantenerse a flote aún con la mitad de los flotadores perforados.
- Venteo: Es el sistema diseñado para prevenir los efectos de las alteraciones bruscas de la presión interna de un tanque de almacenamiento como consecuencia de las operaciones de trasvase o de las variaciones de temperatura ambiente.
- Cubeto: Recipiente abierto que contiene en su interior algunos elementos de almacenamiento y cuya misión es retener los productos contenidos en estos elementos en caso de rotura de los mismos o de funcionamiento incorrecto del sistema de trasiego o manejo.



- Depósitos de doble pared: Depósito construido con dos paredes y fondos dobles, separados uno de otro por un material intermedio el cual crea un espacio con intersticios que permite la detección de fugas.

- TIPOS DE TANQUES:

Los tipos de tanques de almacenamiento son muchos y variados, y requieren numerosos tipos de precauciones de seguridad. La mayor parte de dichos tanques en la industria son del tipo sobre tierra. Dependiendo del estado físico y las condiciones físicas de almacenamiento, se distinguen diferentes tipos de tanques.

Los principales tipos existentes para el almacenamiento de líquidos son:

- Tanques atmosféricos con techos flotantes.
- Tanques atmosféricos con techos fijos o ligeramente variables.
- Tanques de almacenamiento para presiones moderadas (desde presión atmosférica a 300 psig).
- Almacenaje para altas presiones (desde 300 psig a 1000 psig).

En cuanto al almacenamiento de líquidos inflamables, existen varios diseños de tanques; sin embargo se dividen en tres categorías generales según la presión de diseño:

- Tanques atmosféricos para presiones de 0 a 0,5 psig.
- Tanques atmosféricos para bajas presiones, presiones de 0,5 a 15 psig.
- Tanques atmosféricos para presiones mayores, de 1,5 psig en adelante

Además están los tanques o depósitos enterrados donde se pueden encontrar:

- Depósitos de chapa de acero.
- Depósitos de plástico reforzado.
- Depósitos de doble pared



- ASPECTOS A TENER EN CUENTA:

En primera instancia, la normativa pertinente al compuesto que se almacena. Por una banda, el diseño de los tanques, se hará de acuerdo con la normativa vigente para quipos a presión, recogida en el código ASME (*"American Society of Mechanical Engineers, Code for Pressure Vessels"*). Por otra, se tendrán en cuenta la normativa técnica de almacenaje de productos químicos (ITC MIE APQ), con correspondencia al compuesto que se desea almacenar. Para más detalles, consultar el Apartado 5 (Seguridad e Higiene), en concreto, las fichas de seguridad.

Otro factor a tener en cuenta es el concepto de "stock". Es necesario tener presente que el suministro de materias primas o reactivos y que la recogida de los productos acabados, pueden sufrir diversos contratiempos. En casos de que estos se dieran y no estuvieran previstos, se causarían problemas en el funcionamiento de la planta. La solución radica en estimar un tiempo de residencia de cada sustancia teniendo en cuenta la cantidad necesaria/producida y la forma de transporte que se emplea para ésta.

El tanque de almacenamiento se pude ver perjudicado por factores externos como variaciones de los caudales de entrada y salida, movimientos del fluido, las operaciones de carga y descarga, etc. Es por esta razón que es importante sobredimensionar con cierta medida los tanques de almacenamiento, teniendo en cuenta un Factor de Seguridad. De manera convencional, se ha aceptado la suposición de que el tanque debe tener una desocupación entre el 15 y el 20%.

Aquellas zonas en las que hay uniones mediante soldaduras, son más vulnerables, por esta razón se deber tener en cuenta un Factor de soldadura. Esto se debe a que donde hay soldaduras la chapa presenta discontinuidades que pueden llegar a intensificar a las tensiones que está sometido el material. En la Tabla 11.1.1., se muestran los factores de soldadura recomendados para la normativa ASME para diferentes tipos de soldadura.



Tabla 11.1.1.- Factores de Soldadura de acuerdo con la normativa ASME

Tipo de soldadura	Radiografiado Parcial	Radiografiado Total
Simple	0,85	1,00
Doble	0,80	0,90

El tipo de soldadura escogida es la simple; para los tanques que no estén a presión se ha decidido tener un radiografiado parcial (por lo tanto, un factor de soldadura de $E=0,85$), en cambio, para los tanques que estén a presión se ha decidido hacer uso del radiografiado total (y por tanto, un factor de soldadura de $E=1,00$).

Para tener un diseño mecánico idóneo se debe tener en cuenta una relación de altura-diámetro. Según la bibliografía ésta debe estar entre 1,5 y 2. En el caso de tanques cilíndricos, que son la geometría que tendrán la mayoría de los tanques de almacenamiento de esta planta, se debe tener en cuenta, que la altura es solamente la del esqueleto cilíndrico, y no la de todo el tanque, ya que ésta tiene en cuenta también la suma de los cabezales. En cuanto al diámetro, hay que tener presente que aquellos con uno superior a los 4 metros, requerirán condiciones de transporte especiales cuando deban ser trasladados. Ahora bien, no se puede coger como hábito diseñar automáticamente tanques con un diámetro menor de los 4 metros, ya que en caso de que la cantidad de substancia a almacenar sea abundante, se requerirán muchos tanques, y esto no es rentable, ya que aparte de tener muchos más sistemas de control, los costes de *stock* también se verán incrementados. Es más, cabe destacar que tener muchos sistemas de control resulta más costoso que no construir un tanque de grandes dimensiones *in situ*. Cabe destacar, que debido a las propiedades físicas del amoníaco, este será la única materia prima que se almacenará en un tanque esférico. Los productos y subproductos sólidos, así como el catalizador, tampoco se almacenarán en tanques sólidos, sino en silos.



Otro factor importante será el material de construcción de los tanques. A la hora de escogerlo se valoran:

- El tipo de sustancia a almacenar: el material debe ser capaz de soportar la corrosión potencial que pueda estar causada por la sustancia almacenada.
- La resistencia mecánica: el material debe resistir en las condiciones de operación de temperatura y presión.
- El precio del material: en todo proceso se debe encontrar un compromiso entre el coste mínimo del material y su idoneidad para el proceso en cuestión.

Para escoger el material más adecuado en dependencia a la sustancia que se está almacenando, se ha empleado la guía de "*Harrington Industrial Plastics*", la cual incluye los distintos materiales disponibles en la industria y su compatibilidad con los diferentes compuestos.

En cualquier caso, no sólo es suficiente con escoger un buen material de construcción; también hay que prever que por mínima que sea la corrosión, ésta siempre se dará, y por esta razón se debe aplicar un Factor de Corrosión. Este factor de seguridad para la corrosión es dependiente del tipo de material empleado, además de su valor máximo de corrosión estimado durante 10 años, tal y como indica la normativa ASME. Para los aceros inoxidables, material escogido para la construcción de los tanques de almacenamiento, la normativa ASME recomienda tener en cuenta $C_1 = 1,5$ mm.

Otra característica importante en el diseño de los tanque de almacenamiento es su venteo. Según la normativa ITC-MIE-APQ, es necesario este sistema de venteo para prevenir posibles deformaciones de los recipientes contenedores debidas a variaciones de la presión en operaciones de carga y descarga y/o variaciones de la temperatura ambiental. Esta normativa además, en los tanques que estén a presión, exige un sistema de venteo de emergencia para prevenir un exceso de presión interna en caso de un fuego exterior. De acuerdo con la normativa, el sistema de venteo



depende del caudal de entrada y salida del fluido del tanque y también de la respiración artificial del tanque (debida, sobre todo, a variaciones de la temperatura).

Obviamente, otro factor a tener en cuenta es el aislamiento adecuado de los tanques. Éste se debe tener en cuenta para evitar intercambio de calor con el exterior, y también como medida de seguridad, ya que pueden producirse contactos indeseados. Para el diseño de este se ha consultado la empresa ISOVER.

En cuanto al diseño mecánico de los tanques, éste no es posible llevarlo a cabo sin haber determinado previamente las condiciones de diseño. Para determinar la temperatura de diseño, se utilizará la ecuación 11.1.1., la cual, según la normativa ASME, tiene en cuenta que la presión máxima que se puede dar es 20°C superior a la de operación. En el caso de la presión de diseño, la manera de determinarla variará dependiendo de si se trata de un tanque de almacenamiento a presión elevada o a presión atmosférica. En el primer caso se utilizará la ecuación 11.1.2., y en el segundo, la ecuación 11.1.3.

$$T_{diseño} = T_{operación} + 20°C \quad (\text{Ec. 11.1.1.})$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{si } P_o > 22 \frac{kg}{cm^2} \rightarrow P_d = 1,1 \cdot P_o \\ \text{si } P_o < 22 \frac{kg}{cm^2} \rightarrow P_d = P_o + 2,2 \frac{kg}{cm^2} \end{array} \right\} \quad (\text{Ec. 11.1.2.})$$

$$P_d = P_o \text{ absoluta} + 1 \text{ atm} \quad (\text{Ec. 11.1.3.})$$

Es necesario añadir, que todos aquellos en los que la presión de operación sea equivalente a la atmosférica, se deberá tener también en cuenta la presión que ejercerá la columna de líquido, la cual vendrá definida por la ecuación 11.1.4.



$$\Delta P = \rho \cdot g \cdot h_{líquido} \text{ (Ec. 11. 1. 4.)}$$

Dónde:

- P_o , es la presión de operación manométrica
- P_d , es la presión de diseño
- P_o *absoluta*, es la presión de operación manométrica
- ΔP , es la presión ejercida por la columna de líquido
- ρ , es la densidad del líquido
- g , es la constante de aceleración de la gravedad
- $h_{líquido}$, es la altura del tanque ocupada por el líquido

11.1.1. ALMACENAMIENTO DE MATERIAS PRIMERAS: AMONÍACO ANHIDRO (T-101 Y T-102)

11.1.1.1. Conceptos previos

- Normativa: El amoníaco anhidro, que es un compuesto tóxico y peligroso para el Medio Ambiente, debe ser almacenado siguiendo la normativa MIE-APQ-004. Por esta razón se almacenará a alta presión (12,78 atm) y a una temperatura de 25°C. En estas condiciones el amoníaco anhidro se encontrará en fase líquida. Como se trata de un tanque a presión elevada, se construirá de geometría esférica. Es la propia normativa ASME, concretamente en la sección VIII, que para tanques a altas presiones, recomienda utilizar estos tanques criogénicos y de doble pared (GNL). Estos tanques, independientemente de estar indicados para almacenar substancias a presiones interiores de aproximadamente 15 kg/cm², presentan la ventaja fundamental de que se los puede inspeccionar visualmente a ambos lados de la chapa en su totalidad.



- Tiempo de “stock”: Para dimensionar los tanques de almacenamiento de amoníaco, se ha fijado un tiempo de residencia en la planta (tiempo de “stock”) de 2 días. El amoníaco anhidro llegará a la planta de producción de ϵ -caprolactama mediante tuberías (Rack DIXQUIMICS) desde la empresa Vopak Terquimsa. Se ha llegado a un acuerdo con dicha empresa suministradora, y será ésta la que tendrá unos tanques de reserva y asegurará que el suministro no falle. La planta en cuestión, dispone de un tanque criogénico de 10.000 toneladas de almacenamiento de amoníaco anhidro. Recordar que un aumento del tiempo de “stock” en la planta supondría un aumento del volumen de los tanques, lo cual podría causar un problema de espacio en la planta.
- Volumen diario: Teniendo en cuenta que se requiere amoníaco en el reactor de amoximación (R-201) y en disolución de entrada en la reacción de neutralización (R-401), se calcula el volumen necesario diario con la Ecuación 11.1.5. Hay una parte de amoníaco que estará recirculándose continuamente, ya que el amoníaco, al poner la planta en marcha, se introducirá en exceso en la etapa de neutralización, para así asegurar que esta se de de manera idónea. Hay que tener en cuenta que esta cantidad de amoníaco extra al inicio queda en el tanque de almacenamiento.

$$V_{diario} = (962,01 + 2286,27) \left(\frac{kg}{h} \right) \cdot \frac{m^3}{588,4 \text{ kg}} \cdot \frac{24 \text{ h}}{1 \text{ día}} = \\ 132,49 \frac{m^3}{dia} \text{ (Ec. 11.1.5.)}$$



Remarcar que la densidad ha sido obtenida de la base de datos del soporte informático Hysys, para las condiciones de almacenamiento indicadas.

11.1.1.2. Número de tanques necesarios

Para saber la cantidad de tanques necesarios, primero de todo es necesario estimar el volumen de “stock”, teniendo en cuenta el tiempo de “stock” fijado:

$$V_{stock} = 132,49 \frac{m^3}{dia} \cdot 2 dias = 264,99 m^3 \text{ (Ec. 11.1.6.)}$$

Por lo tanto, el volumen de amoníaco anhidro que se debe tener almacenado para asegurar el funcionamiento de la planta es de 264,99 m³.

Además, se decide, por precaución, y también para asegurar que se disponga del amoníaco “extra” en la puesta en marcha de la planta, sobredimensionar el volumen de los tanques un 15%:

$$V_{stock \text{ sobredimensionado}} = 264,99 m^3 \cdot 1,15 = 304,73 m^3 \text{ (Ec. 11.1.7.)}$$

Al ser los tanques con geometría esférica, se escoge un volumen de tanque de 2500 m³, y ya con el volumen sobredimensionado se calculan el número de tanques necesarios:

$$N_{tanques} = \frac{V_{stock \text{ sobredimensionado}}}{V_{tanque}} = \frac{304,73 m^3}{250 m^3} = 1,22 \text{ tanques}$$
$$\cong 2 \text{ tanques (Ec. 11.1.8.)}$$



Ahora, se calcula el porcentaje de ocupación de cada tanque por el líquido o volumen de líquido:

$$\% \text{ Volumen ocupado} = \frac{\frac{V_{stock}}{N_{tanques}}}{V_{tanque}} \cdot 100 = \frac{\frac{264,99 \text{ m}^3}{2}}{250 \text{ m}^3} \cdot 100 = 53\% \quad (\text{Ec. 11. 1. 9.})$$

11.1.1.3. Dimensionamiento de los tanques o diseño funcional

Como ya se ha fijado el volumen de los tanques, 250 m³, y además, se ha decidido que éstos tengan una geometría esférica, ya se pueden calcular sus dimensiones. En la Figura 11.1.1.1., se observa un dibujo esquemático de un tanque de almacenamiento esférico.

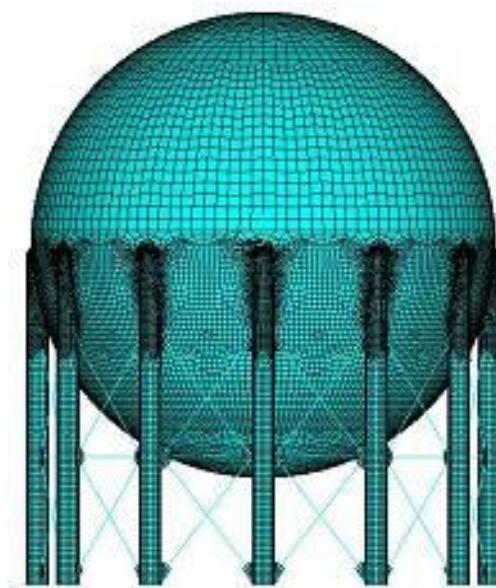


Figura 11.1.1.1.- Esquema de un tanque de almacenamiento esférico



Ahora, ya se puede estimar el radio que deberá tener cada uno de los tanques. Para hacerlo, se aísla el radio en la expresión matemática (Ecuación 11.1.10.) que define el volumen de una esfera.

$$V_{esfera} = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3 = 250 \text{ m}^3 \rightarrow r = 3,91 \text{ m} \quad (\text{Ec. 11.1.10.})$$

11.1.1.4. Condiciones para el diseño mecánico de los tanques

Como se ha dicho, el diseño debe respetar la normativa ASME, concretamente, ITC MIE-APQ004. Como se ha encontrado bibliográficamente que la temperatura de operación (almacenamiento) debe ser de 25°C, la temperatura de diseño tendrá un valor de:

$$T_{diseño} = T_{operación} + 20^\circ\text{C} = 25^\circ\text{C} + 20^\circ\text{C} = 45^\circ\text{C} \quad (\text{Ec. 11.1.1.})$$

También es necesario conocer la presión de diseño. Bibliográficamente, se ha encontrado que el amoníaco anhídrico debe ser almacenado a una presión absoluta de 12,78 atm (13,20 kg/cm²), por tanto, la presión manométrica de operación será:

$$\begin{aligned} P_{o \text{ absoluta}} &= 13,2 \frac{\text{kg}}{\text{cm}^2} = 1,29 \cdot 10^6 \text{ Pa} \rightarrow P_o = 12,78 \text{ atm} - 1 \text{ atm} = 11,78 \text{ atm} \\ &= 12,17 \frac{\text{kg}}{\text{cm}^2} \quad (\text{Ec. 11.1.11.}) \end{aligned}$$

Como Po < 22 kg/cm², la presión de diseño será:



$$P_d = P_0 + 2,2 \frac{kg}{cm^2} = 12,17 + 2,2 = 14,37 \frac{kg}{cm^2} = 13,55 \text{ atm} \quad (\text{Ec. 11.1.2.})$$

11.1.1.5. Material de los tanques

Para decidir el material de construcción, como se ha dicho en la introducción, se ha consultado la guía de la empresa “*Harrington Industrial Plastics*”, que para el caso del amoníaco anhidro propone el Acero Inoxidable AISI 304-L, que además está considerado con una compatibilidad excelente.

11.1.1.6. Espesor de los tanques

Ya se ha explicado, que para el cálculo de los espesores es necesario conocer el límite elástico del material de construcción, ya que la normativa ASME así lo requiere. En la Tabla 11.1.1.1., obtenida bibliográficamente, se observa que el Acero Inoxidable AISI 304-L, a la temperatura de diseño (45°C=113°F), tiene un límite elástico de 15700 psi (1068,32 atm).

Tabla 11.1.1.1.-Tensión máxima admisible en función de la temperatura para el acero inoxidable AISI 304, AISI 304-L, AISI 316 y AISI 316-L.

Specification		Maximum Allowable Stress, ksi (Multiply by 1000 to Obtain psi), for Metal Temp., °F, Not Exceeding									
Number	Grade	-20 to 100	200	300	400	500	600	650	700	750	800
SA-240	304	18,8	17,8	16,6	16,2	15,9	15,9	15,9	15,9	15,5	15,2
SA-240	304L	15,7	15,7	15,3	14,7	14,4	14	13,7	13,5	13,3	13
SA-240	316	18,8	18,8	18,4	18,1	18,0	17,0	16,7	16,3	16,1	15,9
SA-240	316L	15,7	15,7	15,7	15,5	14,4	13,5	13,2	12,9	12,6	12,4

A continuación se calcula la altura de líquido, ya que es necesario conocer la presión que ejerce éste en el fondo del tanque:



$$V_{líquido} = V_{tanque} \cdot \frac{h^2 \cdot (3 \cdot r \cdot h)}{4 \cdot r^3} \quad (\text{Ec. 11.1.12.})$$

$$130,50 = 250 \cdot \frac{h^2 \cdot (3 \cdot 3,91 - h)}{4 \cdot 3,91^3} \rightarrow h_{líquido} = 10,62 \text{ m}$$

Ahora, y con la densidad calculada anteriormente con Hysys para las condiciones de trabajo, se calcula la presión que ejerce el líquido:

$$\Delta P = \rho \cdot g \cdot h_{líquido} = 588,4 \left(\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right) \cdot 9,8 \left(\frac{\text{m}}{\text{s}^2} \right) \cdot 10,62 \text{ (m)} = 61238,32 \text{ Pa} = 0,6044 \text{ atm} \quad (\text{Ec. 11.1.4.})$$

De esta manera, se halla la presión para calcular el espesor de la parte cilíndrica será:

$$P = \Delta P + P_d = 0,6044 \text{ atm} + 13,55 = 14,15 \text{ atm} \quad (\text{Ec. 11.1.13.})$$

Finalmente se calcula el espesor del tanque con la ecuación 11.1.14.:

$$t_{esférico} = \frac{P \cdot R}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P_d} + C_1 + C_2 \quad (\text{Ec. 11.1.14.})$$

Dónde:

- P , es la presión para calcular el espesor en pascales o atmósferas
- R , es el radio interno en mm
- S , el límite elástico en pascales o atmósferas



- E , es el factor adimensional de soldadura
- C_1 , es la tolerancia a la corrosión en mm
- C_2 , es la tolerancia a la fabricación en mm

Substituyendo:

$$t_{esférico} = \frac{14,15 \text{ atm} \cdot 3910 \text{ mm}}{2 \cdot 1068,32 \text{ atm} \cdot 1 - 0,2 \cdot 14,15 \text{ atm}} + 1,5 \text{ mm} + C_2 = 27,42 \text{ mm} + C_2$$

Se acepta como una buena aproximación suponer que la tolerancia a la fabricación equivaldrá al 10% del espesor del tanque calculado o $C_2=1\text{mm}$, lo que tenga un valor más grande. De manera que, redondeando al alza, el espesor será:

$$t_{esférico} = 27,42 \text{ mm} \cdot 1,1 = 30,16 \text{ mm} \rightarrow 31 \text{ mm}$$

Al ser un tanque a presión, y de características bastante especiales, se han buscado espesores comerciales para el almacenamiento de amoníaco anhidro, con la intención de que el espesor estimado fuera suficiente. Se ha visto que éstos siempre oscilan sobre los 20 mm, por lo tanto se considera que los resultados obtenidos son correctos.

11.1.1.7. Venteo total para líquidos

Debido a las operaciones de llenado, vaciado o cambios en la temperatura ambiente, los tanques de almacenamiento pueden sufrir deformaciones, es por esta razón, para prevenir las posibles deformaciones, que se instala un sistema de venteo, como el que se puede apreciar en la Figura 11.1.1.2.

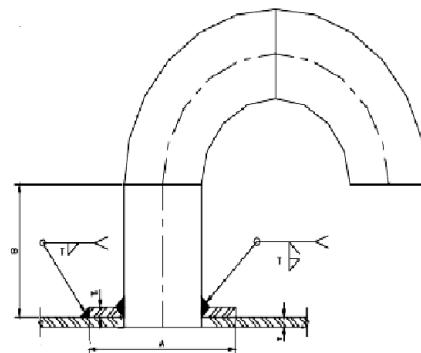


Figura 11.1.1.2.- Esquema del venteo total para líquidos

Dicho sistema de venteo debe tener un diámetro mínimo de 35 mm, y siempre igual o superior al tamaño de la tubería que llena o vacía el tanque, tal y como especifica la normativa ASME. El tanque deberá disponer también de un dispositivo que permita aligerar el exceso de presión interna causada o no por un fuego exterior.

Para dimensionarlo, se empieza con el cálculo de la superficie húmeda:

$$A_h = 4 \cdot \pi \cdot r^2 = 4 \cdot \pi \cdot 3,91^2 = 192,11 \text{ m}^2 \quad (\text{Ec. 11.1.15.})$$

A continuación se estima el calor que se daría en caso de fuego externo:

$$Q_{fuego} = 139,7 \cdot F \cdot A_h^{0,82} \cdot 10^3 \quad (\text{Ec. 11.1.16.})$$

Dónde:

- Q_{fuego} , es el calor que se daría en caso de fuego externo en KJ/h
- F , es el factor adimensional de reducción
- A_h , es la superficie húmeda en metros



Substituyendo:

$$Q_{fuego} = 139,7 \cdot 1 \cdot 192,11^{0,82} \cdot 10^3 = 1,042 \cdot 10^7 \text{ KJ/h}$$

Por último se calcula la capacidad de venteo, teniendo en cuenta que para ello hay que conocer el calor latente de vaporización del amoníaco anhidro a la temperatura deseada (Robert H. Perry, 2008) y usar la ecuación 11.1.17.:

$$C_{venteo} = \frac{4,414 \cdot Q_{fuego}}{\lambda_{vap} \cdot \sqrt{M}} \quad (\text{Ec. 11.1.17.})$$

Dónde:

- C_{venteo} , es la capacidad de venteo en m^3/h
- λ_{vap} , es el calor latente de vaporización del reactivo a la temperatura deseada en KJ/Kg
- M , es el peso molecular del reactivo

Substituyendo:

$$C_{venteo} = \frac{4,414 \cdot 1,042 \cdot 10^7 \left(\frac{\text{KJ}}{\text{h}}\right)}{1185,1 \left(\frac{\text{KJ}}{\text{Kg}}\right) \cdot \sqrt{17,030 \left(\frac{\text{Kg}}{\text{kmol}}\right)}} = 9401,07 \text{ m}^3/\text{h}$$

11.1.1.8. Aislamiento

Debido a las propiedades del amoníaco anhidro, los tanques de almacenamiento deben estar aislados térmicamente. El tanque criogénico provocará la



presión alta, haciendo el vacío entre pared y pared, pero por seguridad, continúa siendo importante aislar los tanques del exterior.

Concretamente, se aislaran mediante lana de roca, ya que este material resulta ser un buen aislante, y para más seguridad, es incombustible. El espesor de aislamiento deberá ser de 50 mm. Como ya se ha dicho en la introducción, la empresa escogida para proporcionar el aislante es *Isover*; el modelo escogido es el Spintex HP-353. El aislante estará cubierto por una fina capa de aluminio, metal caracterizado por su extremadamente baja conductividad térmica.

11.1.1.9. Dimensionamiento del cubeto de retención

Por normativas de seguridad, tal y como se ha explicado en el Apartado 5, Seguridad e Higiene, todos los tanques de almacenamiento de líquidos inflamables y combustibles, deben de disponer de un cubeto de retención. Para más seguridad y para facilitar maniobras en caso de incendio, cada hilera de cubetos debe disponer de manera adyacente de una vía de acceso que permita la intervención de la brigada contra incendios. Es decir, cada cubeto considerado independiente deberá estar separado al menos 15 metros. Además, en el fondo de la cubeta deberá haber una inclinación, de manera que en caso de vertido, el líquido se desplace de manera más rápida a una zona más alejada de los tanques; quedando de esta manera facilitada la evacuación de los líquidos contenidos.

- Anchura y longitud del cubeto:

Para dimensionar el cubeto de retención, el primer paso es estimar el diámetro total del tanque, teniendo en cuenta el espesor de la chapa de AISI-304L y del aislante de lana de roca. Para hacerlo se utiliza la ecuación 11.1.18.:

$$D_{total} = D + (2 \cdot t_{esfera}) + (2 \cdot t_{lana}) = 2 \cdot 3,91 + (2 \cdot 31 \cdot 10^{-3}m) + (2 \cdot 50 \cdot 10^{-3}m) = 7,982 \text{ m} \quad (\text{Ec. 11.1.18.})$$



El siguiente paso es calcular la anchura y longitud del cubeto, y se hace con las ecuaciones 11.1.19. y 11.1.20.:

$$L_{cubeto} = \left(\frac{N}{2}\right) \cdot D_{total} + S_{tanque} \cdot \left(\frac{N}{2} - 1\right) + 2 \cdot S_{cubeto} \quad (\text{Ec. 11.1.19.})$$

$$W_{cubeto} = 2 \cdot D_{total} + S_{tanque} + 2 \cdot S_{cubeto} \quad (\text{Ec. 11.1.20.})$$

Dónde:

- L_{cubeto} , es la longitud del cubeto en metros
- W_{cubeto} , es la anchura del cubeto en metros
- D_{total} , es el diámetro total del tanque teniendo en cuenta los espesores en metros
- N , es el número total de tanques
- S_{tanque} , es la distancia de seguridad entre tanques en metros
- S_{cubeto} , es la distancia de seguridad entre la pared del cubeto y la pared del tanque en metros

Estas medidas, por normativa, deben guardar unas distancias mínimas de seguridad, que son de 1 metro entre el cubeto y la pared del tanque y de 2 metros entre tanques. Para más seguridad se escoge que la distancia entre cubeto y tanque sea igual a la distancia entre los tanques, y por tanto, igual a los 2 metros (S_{tanque}).

Para determinar la distancia del cubeto se han consultado fuentes bibliográficas y se ha visto que la distancia típica es de 2,5 metros, siendo la mínima de 1,5 metros cuando se almacena amoníaco anhídrico. En conclusión, con el objetivo de ser lo más cauto posible, se escoge que S_{cubeto} tenga un valor de 2,5 metros. Por lo



tanto, la longitud del cubeto, si se substituyen los valores adecuados en la ecuación 11.1.19, se halla que la longitud del cubeto es:

$$L_{cubeto} = \left(\frac{2}{2}\right) \cdot 7,982 + 2 \cdot \left(\frac{2}{2} - 1\right) + 2 \cdot 2,5 = 12,982 \text{ m}$$

Para encontrar la anchura del cubeto, en cambio, se substituye en la ecuación 11.1.20.:

$$W_{cubeto} = 2 \cdot 7,982 + 2 + 2 \cdot 2,5 = 22,964 \text{ m}$$

- Altura del cubeto:

Para estimar la altura del cubeto, de nuevo, hay que tener en cuenta la normativa MIE-APQ-001. Ésta dice que la altura del cubeto viene dada por el volumen de líquido que puede retener éste; y que este volumen deber ser igual al volumen entero del tanque más grande contenidos en el cubeto. En este caso, los dos tanques tienen un volumen de 250 m³ cada uno, por lo que el volumen mínimo que debe ser capaz de almacenar el cubeto es de 250 m³.

Teniendo en cuenta la explicación anterior, la altura del cubeto vendrá dada por la ecuación 11.1.21.:

$$H_{cubeto} = \frac{V_{tanque}}{A_{libre}} \quad (\text{Ec. 11.1.21.})$$

Dónde:

- H_{cubeto} , es la altura del cubeto en metros
- V_{tanque} , es el volumen del tanque
- A_{libre} , es la superficie libre del cubeto en m²



Como se ve, es necesario encontrar la superficie del cubeto que está libre, y esto se hará con la ecuación 11.1.22.:

$$A_{libre} = L_{cubeto} \cdot W_{cubeto} - A_{ocupada} \text{ (Ec. 11.1.22.)}$$

Dónde:

- $A_{ocupada}$, es la superficie del cubeto ocupada por los tanques en m^2

Esta superficie se encuentra con la ecuación 11.1.23.:

$$A_{ocupada} = \left(\left(\frac{N}{2} \right) \cdot D_{total} + S_{tanque} \cdot \left(\frac{N}{2} - 1 \right) \right) \cdot (2 \cdot D_{total} + S_{tanque}) = \\ \left(\left(\frac{2}{2} \right) \cdot 7,982 + 2 \cdot \left(\frac{2}{2} - 1 \right) \right) \cdot (2 \cdot 7,982 + 2) = 143,39 \text{ } m^2 \text{ (Ec. 11.1.23.)}$$

Ahora, ya se puede encontrar la superficie libre substituyendo en la ecuación 11.1.22.:

$$A_{libre} = 12,982 \cdot 22,964 - 143,39 = 154,73 \text{ } m^2$$

Y por último, la altura del cubeto substituyendo en la ecuación 11.1.21.:

$$H_{cubeto} = \frac{250 \text{ } m^3}{154,73 \text{ } m^2} = 1,62 \text{ } m$$



Si se sobredimensiona la altura un 15%:

$$H_{cubeto} = 1,62 \cdot 1,15 = 1,86 \text{ m}$$

11.1.1.10. Peso total del tanque

Cuando se dice peso total del tanque, éste está referido al peso del tanque vacío más el peso de la sustancia que debe almacenar. Primero se calcula el peso del tanque vacío:

$$P_{vacío} = P_{esfera} = V_{acero} \cdot \rho_{AISI304L} \text{ (Ec. 11.1.24.)}$$

Dónde:

- P_{esfera} , es el peso del tanque esférico en kg
- V_{acero} , es el volumen de AISI 340-L en m^3
- $\rho_{AISI304L}$, es la densidad del acero AISI 340-L en kg/m^3

Previamente, en todo caso, es necesario estimar el volumen de acero que compondrá el tanque:

$$V_{acero} = \frac{4 \cdot \pi \cdot (r + t_{esfera})^3}{3} - \frac{4 \cdot \pi \cdot (r)^3}{3} \text{ (Ec. 11.1.25.)}$$

Dónde:

- V_{acero} , es el volumen de AISI 340-L en m^3
- t_{esfera} , es el espesor del tanque esférico en m



- r , es el radio del tanque en m

Substituyendo:

$$V_{acer} = \frac{4 \cdot \pi \cdot (3,91 + 0,031)^3}{3} - \frac{4 \cdot \pi \cdot (3,91)^3}{3} = 6,00 \text{ m}^3$$

De forma que el peso del tanque vacío será:

$$P_{vacío} = 6,00 \text{ m}^3 \cdot \frac{8030 \text{ kg}}{\text{m}^3} = 48203,58 \text{ Kg}$$

Ahora ya se puede calcular el peso del tanque operativo, teniendo en cuenta el volumen que tendrá contenido de amoníaco anhidro y que la densidad de éste en las condiciones del almacenamiento es de 588,4 kg/m³.

$$P_{operativo} = 48203,58 \text{ Kg} + 132,5 \text{ m}^3 \cdot 588,4 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} = 126166,58 \text{ Kg}$$

(Ec.11.1.26.)

También se calcula el peso del tanque si éste estuviera lleno de agua:

$$P_{agua} = 48203,58 \text{ Kg} + 132,5 \text{ m}^3 \cdot 998,2 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} = 180465,08 \text{ Kg} \quad (\text{Ec. 11.1.27.})$$

11.1.1.11. Carga y descarga de los tanques de amoníaco anhidro



Los tanques esféricos de amoníaco anhidro están a presión, la cual cosa conlleva ciertos puntos a tener en cuenta a la hora de operar los tanques, con la intención de mantener la elevada presión de estos de manera constante.

Cuando se deban cargar los tanques con el amoníaco anhidro, estos deberán estar llenos de nitrógeno. De esta manera, conforme se vaya llenando el tanque con amoníaco anhidro y líquido, será éste mismo el que vaya desplazando al nitrógeno, el cuál saldrá por otra tubería.

Se operará de manera similar al descargar los tanques; conforme el amoníaco vaya siendo descargado por la parte inferior de los tanques de almacenamiento esféricos, habrá una entrada de nitrógeno por la zona superior del tanque que mantendrá la presión de éste constante en el valor deseado, impidiendo así, que el amoníaco se vaporice.

11.1.1.12. Especificaciones de los tanques

A modo de resumen, en la Tabla 11.1.1.2. se adjuntan las especificaciones más importantes calculadas a lo largo de este subapartado respecto a los tanques de almacenamiento de amoníaco anhidro.

Tabla 11.1.1.2.- Principales especificaciones de los tanques de almacenamiento de amoníaco anhidro

ESPECIFICACIONES	
Tanque	
Número de tanques	2



Volumen diario (m³/día)	132,49
Tiempo stock (días)	2
Temperatura de diseño (ºC)	45
Presión de diseño (atm)	13,55
Volumen del tanque (m³)	250
Diámetro total del tanque (m)	7,82
% volumen ocupado (%)	53
Material de diseño	Acero Inoxidable AISI 304-L
Aislante	Lana de roca (50 mm de espesor)
Espesor del tanque (mm)	31
Capacidad de viento (m³/h)	9401,07
Peso del tanque operativo (kg)	126166,58
Cubeto	
Longitud (m)	12,982
Anchura (m)	22,964
Altura (m)	1,86

11.1.2. ALMACENAMIENTO DE MATERIAS PRIMERAS: CICLOHEXANONA (T-103 A T-105)

11.1.2.1. Conceptos previos

- **Normativa:** La ciclohexanona, que es un compuesto inflamable, debe ser almacenada siguiendo la normativa MIE-APQ-001. Concretamente está categorizada como B2. Su punto de inflamación es a los 44ºC y su temperatura de ebullición tiene un valor de 156ºC. En cuanto a su temperatura de fusión, ésta se encuentra entorno los 16,4 ºC negativos. Por estas razones se almacenará a 20ºC y a presión atmosférica.



- Volumen diario: Teniendo en cuenta que se requiere ciclohexanona en el reactor de amoximación (R-201), se calcula el volumen diario necesario como:

$$V_{diario} = 5555,86 \left(\frac{kg}{h} \right) \cdot \frac{m^3}{947,8 \text{ kg}} \cdot \frac{24 \text{ h}}{1 \text{ día}} = 140,68 \frac{m^3}{dia} \text{ (Ec. 11.1.28.)}$$

Remarcar que la densidad ha sido obtenida del Perry (Robert H. Perry, 2008), para las condiciones de almacenamiento indicadas.

- Tiempo de “stock”: Para dimensionar los tanques de almacenamiento de ciclohexanona, se ha fijado un tiempo de residencia en la planta (tiempo de “stock”) de 4 días. La ciclohexanona llegará a la planta de producción de ϵ -caprolactama mediante camiones. Éstos serán de 30 m^3 . Teniendo en cuenta el requerimiento diario calculado con la ecuación 11.1.33., se deduce que se necesitaran entre 4 y 5 camiones al día. Suponiendo que en un día laboral ordinario pueden llegar camiones durante 12 horas (de 8 de la mañana a 20 de la tarde), llegará un camión con ciclohexanona cada 3 horas los días que se requieran 4 camiones. Recordar que un aumento del tiempo de “stock” en la planta supondría un aumento del volumen de los tanques, lo cual podría causar un problema de espacio en la planta.

11.1.2.2. Número de tanques necesarios



Siguiendo el protocolo del apartado 11.1.1.2. se calcula el número de tanques.

Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 11.1.2.1.:

Tabla 11.1.2.1.- Resultados para el cálculo del número de tanque para el almacenamiento de Ciclohexanona

V stock	562,72 m³
V stock sobredimensionado	647,13 m³
V tanque	250 m³
N tanques	2,5886≈3 tanques
% volumen ocupado	75,03 %

11.1.2.3. Dimensionamiento de los tanques o diseño funcional

Como se ha fijado el volumen de los tanques de almacenamiento, concretamente en un volumen de 250 m³, y además, se decide que éstos tengan una geometría cilíndrica, ya se pueden calcular sus dimensiones. Primero de todo, añadir que se ha decidido también, que los tanques tengan un cabezal semiesférico, como el mostrado en la Figura 11.1.2.1., y un diámetro de 6 metros.

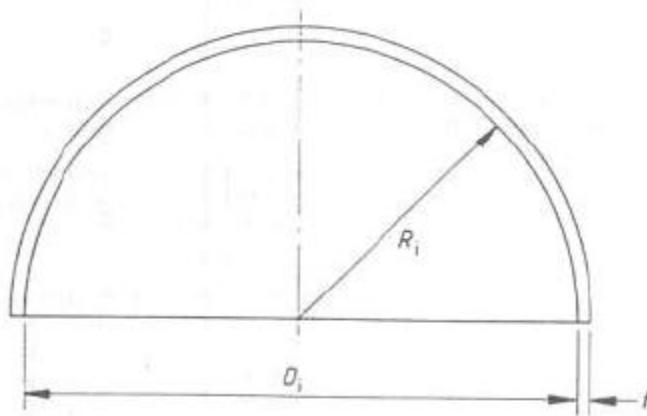


Figura 11.1.2.1.- Esquema de un cabezal esférico

Ahora, ya se puede estimar la altura que tendrán los tanques, empezando por el volumen del cabezal semiesférico:

$$V_{cabezal} = \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot r^3 = \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot 3^3 = 56,55 \text{ m}^3 \quad (\text{Ec. 11.1.29.})$$

Seguidamente se haya el volumen de la parte cilindrica del tanque, asumiendo que ésta será la diferencia de volúmenes entre el volumen del tanque y el del cabezal semiesférico:

$$V_{cilindro} = V_{tanque} - V_{cabezal} = 250 \text{ m}^3 - 56,55 \text{ m}^3 = 193,45 \text{ m}^3 \quad (\text{Ec. 11.1.30.})$$

Por último, teniendo presente el cálculo del volumen de un cilindro, se puede aislar el valor que debe tener la altura de éste para que se cumplan las condiciones impuestas hasta el momento:



$$V_{cilindro} = \frac{\pi}{4} \cdot D^2 \cdot h \rightarrow h_{cilindro} = \frac{4 \cdot 193,45 \text{ m}^3}{\pi \cdot (6 \text{ m})^2} = 6,84 \text{ m} \quad (\text{Ec. 11.1.31.})$$

Por otra banda, asumiendo que la proporción de la altura del cabezal con el diámetro del tanque debe ser la mitad, el cabezal tendrá una altura de 3 metros. Como consecuencia, la altura total del tanque será:

$$h_{tanque} = h_{cabezal} + h_{cilindro} = 3 \text{ m} + 6,84 \text{ m} = 9,84 \text{ m} \quad (\text{Ec. 11.1.32.})$$

11.1.2.4. Condiciones para el diseño mecánico de los tanques

Como se ha dicho, el diseño debe respetar la normativa ASME, concretamente, ITC MIE-APQ001, para el caso de la ciclohexanona, ya que ésta es inflamable. Dentro de esta categoría, este compuesto pertenece a la subclase B2. Como se ha explicado en el apartado de conceptos previos, la ciclohexanona se puede almacenar a una temperatura de 20°C, por lo tanto, la temperatura de diseño será:

$$T_{diseño} = T_{operación} + 20^\circ\text{C} = 25^\circ\text{C} + 20^\circ\text{C} = 45^\circ\text{C} \quad (\text{Ec. 11.1.1.})$$

Por lo referido a la presión de diseño, como este es un tanque con una presión absoluta de operación equivalente a la atmosférica, la presión de diseño se determinará de la siguiente manera:

$$P_d = P_{o \text{ absoluta}} + 1 \text{ atm} = 2 \text{ atm} \quad (\text{Ec. 11.1.3.})$$



11.1.2.5. Material de los tanques

Para decidir el material de construcción, como se ha dicho en la introducción, y como se ha hecho en apartados anteriores, se ha consultado la guía de la empresa *"Harrington Industrial Plastics"*. Para el caso de la ciclohexanona, ningún material está clasificado con compatibilidad excelente. La mayoría de materiales recomendados son polímeros, como por ejemplo el teflón. El Acero Inoxidable AISI 304-L, que es resistente a todo tipo de corrosión, no será menos para la ciclohexanona, la cual además no está clasificada como corrosiva. En cualquier caso, se decide escoger este acero, porque los otros tanques también están construidos de este material, dándoles de esta manera versatilidad, y la posibilidad de poderse utilizar para otros compuestos si se diera el caso; e incluso, en situaciones extremas como tanque pulmón.

11.1.2.6. Espesor de los tanques

Ya se ha explicado, que para el cálculo de los espesores es necesario conocer el límite elástico del material de construcción, ya que la normativa ASME así lo requiere. En la Tabla 11.1.1.1., obtenida bibliográficamente, se observa que el Acero Inoxidable AISI 304-L, a una temperatura de 40ºC (temperatura de diseño), tiene un límite elástico de 1068,32 atm.

A continuación se calcula la altura de líquido, suponiendo que el volumen del tanque y el líquido deberían ser iguales, ya que es necesario conocer la presión que ejerce la columna de ciclohexanona en el fondo del tanque:

$$V_{líquido} = V_{tanque} = \frac{\pi}{4} \cdot D^2 \cdot h \quad (\text{Ec. 11. 1. 33.})$$

$$187,58 \text{ m}^3 = \frac{\pi}{4} \cdot 6^2 \cdot h_{líquido} \rightarrow h_{líquido} = 6,63 \text{ m}$$



Ahora, y con la densidad de la ciclohexanona en las condiciones de trabajo, se calcula la presión que ejerce el líquido:

$$\Delta P = \rho \cdot g \cdot h_{líquido} = 947,80 \left(\frac{kg}{m^3} \right) \cdot 9,8 \left(\frac{m}{s^2} \right) \cdot 6,63 (m) = 61582,36 Pa = 0,6081 atm \quad (\text{Ec. 11. 1. 4.})$$

De esta manera, se halla la presión con la que se determinará el espesor, y que será la suma de la presión ejercida por el líquido y la de diseño:

$$P = \Delta P + P_d = 0,6081 atm + 2 atm = 2,6081 atm \quad (\text{Ec. 11. 1. 34.})$$

Finalmente se calcula el espesor del tanque con la ecuación 11.1.35.:

$$t_{cilindro} = \frac{P \cdot R}{S \cdot E + 0,4 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad (\text{Ec. 11. 1. 35.})$$

Dónde:

- P , es la presión para calcular el espesor en pascales o atmósferas
- R , es el radio interno en mm
- S , el límite elástico en pascales o atmósferas
- E , es el factor adimensional de soldadura
- C_1 , es la tolerancia a la corrosión en mm
- C_2 , es la tolerancia a la fabricación en mm



Teniendo en cuenta que en este caso, como el equipo no trabaja a presión elevada, el valor del factor de soldadura será 0,85 (soldadura simple con radiografiado parcial); y substituyendo y redondeando al alza:

$$t_{cilindro} = \frac{2,6081 \text{ atm} \cdot 3000 \text{ mm}}{1068,32 \text{ atm} \cdot 0,85 + 0,4 \cdot 2,6081 \text{ atm}} + 1,5 \text{ mm} + C_2 = 10,11 + C_2$$

Se acepta como una buena aproximación suponer que la tolerancia a la fabricación (C_2) equivaldrá al 10% del espesor del tanque calculado o a un 1 mm, lo que resulte más grande. En este caso, se considerará C_2 como 1 mm. De manera que, redondeando al alza, el espesor será:

$$t_{cilindro} = 10,11 \text{ mm} + 1 \text{ mm} = 11,11 \text{ mm} \rightarrow 12 \text{ mm}$$

Por otra parte, el grosor del cabezal será menor, ya que éste no tiene que soportar la presión que ejerce el líquido. Es decir, la presión que se utilizará será la de diseño. Para calcularlo se utiliza la ecuación 11.1.36:

$$t_{cabezal} = \frac{P \cdot R}{2 \cdot S \cdot E + 0,8 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad (\text{Ec. 11.1.36.})$$

$$t_{cabezal} = \frac{2,6081 \text{ atm} \cdot 3000 \text{ mm}}{2 \cdot 1068,32 \cdot 0,85 + 0,8 \cdot 2,6081 \text{ atm}} + 1,5 \text{ mm} + C_2 = 4,80 \text{ mm} + C_2$$

De la misma manera que para el espesor de la parte cilíndrica, se considera la tolerancia a la fabricación de 1mm.



$$t_{cabeza} = 3,7 \text{ mm} + 1 \text{ mm} = 5,8 \text{ mm} \rightarrow 6 \text{ mm}$$

El espesor del fondo se calcula como la suma de 6,5 mm más el factor de seguridad de corrosión, 1,5 mm; siempre y cuando, el grosor del tanque sea inferior a éste valor, ya que es recomendable, por seguridad, que el fondo del tanque tenga como mínimo este espesor. Por lo tanto, el fondo inferior, en este caso no se calculará de esta manera, sino que tendrá el mismo espesor que la parte cilíndrica, es decir, 12 mm.

11.1.2.7. Venteo total para líquidos

Aplicando las ecuaciones explicadas en el apartado 11.1.1.7., se ha podido diseñar el venteo total para líquidos en el caso de los tanques de almacenamiento de ciclohexanona. La única diferencia, es que como la geometría de los tanques es diferente, la superficie húmeda, también se calcula de manera diferente.

$$A_h = \pi \cdot D \cdot h_{tanque} = \pi \cdot 6 \cdot 9,84 = 185,52 \text{ m}^2 \quad (\text{Ec. 11.1.37.})$$

Los resultados están recogidos en la Tabla 11.1.2.4.:

Tabla 11.1.2.4.- Resultados del venteo total para líquidos de los tanques de almacenamiento de Ciclohexanona

A h	185,52 m²
Q fuego	1,01·10⁷ KJ/h
M	98,15
λ vap	412,74 KJ/Kg
C venteo	10926,59 m³/h



11.1.2.8. Aislamiento

Igual que en casos anteriores, el aislamiento a utilizar será de lana de roca, con un espesor de 50 mm, y que será proporcionado por la empresa Isover. El modelo escogido es el Spintex HP-353.

11.1.2.9. Dimensionamiento del cubeto de retención

El dimensionamiento del cubeto de retención se ha hecho de la misma manera que en el apartado 11.1.1.9., aplicando las ecuaciones explicadas. En la Tabla 11.1.2.5. se pueden observar los resultados obtenidos para el caso de la ciclohexanona.

Tabla 11.1.2.5.- Dimensionamiento del cubeto de retención para el almacenamiento de Ciclohexanona

D total	6,124 m
S tanque	2 m
S cubeto	2,5 m
L cubeto	15,186 m
W cubeto	19,248 m
A ocupada	145,13 m²
A libre	147,17 m²
H cubeto	1,70 m
H cubeto sobredimensionada un 15%	1,95 m



11.1.2.10. Peso total del tanque

Cuando se dice peso total del tanque, éste está referido al peso del tanque vacío más el peso de la sustancia que debe almacenar. Primero se calcula el peso del tanque vacío:

$$P_{vacío} = P_{fondo} + P_{cilindro} + P_{cabezal} \text{ (Ec. 11.1.38.)}$$

Dónde:

- P_{fondo} , es el peso del fondo del tanque en kg
- $P_{cilindro}$, es el peso de la parte cilíndrica (sin las tapas) en kg
- $P_{cabezal}$, es el peso del cabezal semiesférico en kg

Previamente, en todo caso, es necesario estimar los pesos justamente mencionados, y se hace de la siguiente manera:

$$P_{fondo} = A_{fondo} \cdot t_{fondo} \cdot \rho_{AISI304-L} = \pi \cdot r^2 \cdot t_{fondo} \cdot \rho_{AISI304-L} \text{ (Ec. 11.1.39.)}$$

$$P_{cabezal} = V_{cabezal \, chapa} \cdot \rho_{AISI304-L} = \left[\frac{2}{3} \cdot \pi \cdot (r + t_{cabezal})^3 - \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot r^3 \right] \cdot \rho_{AISI304-L} \text{ (Ec. 11.1.40.)}$$

$$P_{cilindro} = A_{cilindro \, sin \, tapas} \cdot t_{cilindro} \cdot \rho_{AISI304-L} = \pi \cdot D \cdot h_{cilindro} \cdot t_{cilindro} \cdot \rho_{AISI304-L} \text{ (Ec. 11.1.41.)}$$

Dónde:



- A_{fondo} , es la superficie del fondo en m^2
- t_{fondo} , es el espesor del fondo en m
- $\rho_{AISI304-L}$, es la densidad del acero inoxidable AISI 304-L en kg/m^3
- $V_{cabezal chapa}$, es el volumen de chapa del cabezal semiesférico en m^3
- $A_{cilindro sin tapas}$, es la superficie de la parte cilíndrica (las paredes del tanque) en m^2
- $t_{cilindro}$, es el espesor de las paredes cilíndricas en m
- r , es el radio del tanque en m
- D , es el diámetro de tanque en m

Substituyendo:

$$P_{fondo} = \pi \cdot (3m)^2 \cdot 12 \cdot 10^{-3}m \cdot 8030 \frac{Kg}{m^3} = 2724,51 Kg$$

$$P_{cabezal} = \left[\frac{2}{3} \cdot \pi \cdot (3m + 6 \cdot 10^{-3}m)^3 - \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot (3m)^3 \right] \cdot 8030 \frac{Kg}{m^3} = 2729,97 Kg$$

$$P_{cilindro} = \pi \cdot 6m \cdot 6,84m \cdot 12 \cdot 10^{-3}m \cdot 8030 \frac{Kg}{m^3} = 12427,31 Kg$$

De forma que el peso del tanque vacío será:

$$P_{vacío} = 2724,51 Kg + 2729,97 Kg + 12427,31 Kg = 17881,80 Kg$$



Ahora ya se puede calcular el peso del tanque operativo, teniendo en cuenta el volumen que tendrá contenido de amoníaco anhidro y que la densidad de éste en las condiciones del almacenamiento es de 588,4 kg/m³.

$$P_{operativo} = 17881,80 \text{ Kg} + 187,58 \text{ m}^3 \cdot 947,8 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} = \\ 195669,32 \text{ Kg} \text{ (Ec. 11.1.42.)}$$

También se calcula el peso del tanque si éste estuviera lleno de agua:

$$P_{agua} = 48203,58 \text{ Kg} + 187,58 \text{ m}^3 \cdot 998,2 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} = \\ 2051238,31 \text{ Kg} \text{ (Ec. 11.1.43.)}$$

Es recomendable comprobar si el terreno será capaz de resistir el peso del tanque. Teniendo en cuenta que la resistencia del terreno será de 2 Kg/cm² a 1,5 m de profundidad sobre grabas, se calcular con la fuerza que ejercerá el tanque sobre el suelo:

$$\frac{P_{operativo}}{A_{fondo}} = \frac{195669,32 \text{ Kg}}{\pi \cdot (3\text{m})^2 \cdot \frac{(100\text{cm})^2}{1\text{m}^2}} = 0,69 \frac{\text{Kg}}{\text{cm}^2} \text{ (Ec. 11.1.44.)}$$

11.1.2.11. Especificaciones de los tanques

A modo de resumen, en la Tabla 11.1.2.7. se adjuntan las especificaciones más importantes calculadas a lo largo de este subapartado respecto a los tanques de almacenamiento de ciclohexanona.



Tabla 11.1.2.7.- Principales especificaciones de los tanques de almacenamiento de ciclohexanona

ESPECIFICACIONES	
Tanque	
Número de tanques	3
Volumen diario (m³/día)	140,68
Tiempo stock (días)	4
Temperatura de diseño (°C)	45
Presión de diseño (atm)	2
Volumen del tanque (m³)	250
Diámetro total del tanque (m)	6,124
Altura total del tanque (m)	9,84
% volumen ocupado (%)	75,03
Material de diseño	Acero Inoxidable AISI 304-L
Aislante	Lana de roca (50 mm de espesor)
Espesor del tanque (mm)	12
Espesor del cabezal (mm)	6
Espeso del fondo (mm)	12
Capacidad de venteo (m³/h)	10926,59
Peso del tanque operativo (kg)	195669,32 Kg
Cubeto	
Longitud (m)	15,186
Anchura (m)	19,248
Altura (m)	1,70



11.1.3. ALMACENAMIENTO DE MATERIAS PRIMERAS: PERÓXIDO DE HIDRÓGENO (T-106 Y T-107)

11.1.3.1. Conceptos previos

- Normativa: El peróxido de hidrógeno se caracteriza por ser un compuesto considerablemente corrosivo y comburente. La normativa que contempla este tipo de sustancias es la MIE-APQ-006, clase D. Se almacenará una mezcla de peróxido de hidrógeno y agua al 50% en peso, disminuyéndose considerablemente su peligrosidad. El peróxido de hidrógeno, tiene una temperatura de ebullición de 150,2°C, por esta razón se decide almacenarlo a presión atmosférica y a 20 °C.
- Volumen diario: Teniendo en cuenta que se requiere peróxido de hidrógeno en el reactor de amoximación (R-201) y también en la oxidación avanzada en el tratamiento de residuos (de R-901 a R-906) se calcula el volumen necesario diario como:

$$V_{diario} = \left(4323,24 \left(\frac{kg}{h} \right) \cdot \frac{m^3}{1195,3 \text{ kg}} + 0,083 \frac{m^3}{h} \right) \cdot \frac{24 \text{ h}}{1 \text{ día}} = \\ 88,80 \frac{m^3}{dia} \quad (\text{Ec. 11.1.45.})$$

- Tiempo de “stock”: Para dimensionar los tanques de almacenamiento de peróxido de hidrógeno, se ha fijado un tiempo de residencia en la planta (tiempo de “stock”) de 4 días. De la misma manera que la ciclohexanona, el peróxido de hidrógeno llegará a la planta de producción de ε-caprolactama mediante camiones. Éstos serán de 30 m³. Teniendo en cuenta el requerimiento diario calculado con la ecuación 11.1.45., se deduce que se necesitarán 3 camiones al día. Suponiendo que en un día laboral ordinario pueden llegar camiones



durante 12 horas (de 8 de la mañana a 20 de la tarde), llegará un camión con peróxido de hidrógeno cada 4 horas. Recordar que un aumento del tiempo de “stock” en la planta supondría un aumento del volumen de los tanques, lo cual podría causar un problema de espacio en la planta.

11.1.3.2. Número de tanques necesarios

Siguiendo el protocolo del apartado 11.1.2.2. se calcula el número de tanques. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 11.1.2.1.:

Tabla 11.1.3.1.- Resultados para el cálculo del número de tanque para el almacenamiento de peróxido de hidrógeno

V stock	355,2 m³
V stock sobredimensionado	408,48 m³
V tanque	250 m³
N tanques	1,63≈2 tanques
% volumen ocupado	71,04%

11.1.3.3. Dimensionamiento de los tanques

Los resultados del dimensionamiento de los tanques se encuentran recogidos en la Tabla 11.1.3.2.; los cuales han sido calculados de la misma manera que en el apartado 11.1.2.3.



Tabla 11.1.3.2.- Dimensionamiento de los tanques de almacenamiento de peróxido de hidrógeno

V cabezal	56,55 m³
V cilindro	193,45 m³
h cilindro	6,84 m
h tanque	9,84 m

11.1.3.4. Diseño mecánico de los tanques

Ya se ha comentado en los aspectos previos que el peróxido de hidrógeno, al ser una sustancia comburente y oxidante, se rige por la normativa ASME, concretamente, ITC MIE-APQ006. También se ha comentado que el peróxido de hidrógeno se puede almacenar a una temperatura de 20°C, por lo tanto, la temperatura de diseño será:

$$T_{diseño} = T_{operación} + 20°C = 25°C + 20°C = 45°C \quad (\text{Ec. 11.1.1.})$$

Por lo referido a la presión de diseño, como este es un tanque con una presión absoluta de operación equivalente a la atmosférica, la presión de diseño se determinará de la siguiente manera:

$$P_d = P_{o \text{ absoluta}} + 1 \text{ atm} = 2 \text{ atm} \quad (\text{Ec. 11.1.3.})$$



11.1.3.5. Material de los tanques

Para decidir el material de construcción, como se ha dicho en la introducción, y como se ha hecho en apartados anteriores, se ha consultado la guía de la empresa *"Harrington Industrial Plastics"*. En el caso del peróxido de hidrógeno, igual que en el caso de la ciclohexanona, ningún material está clasificado con compatibilidad excelente. La mayoría de materiales recomendados son polímeros, como por ejemplo el teflón, el PVC o el viton. Igual que en el caso de la ciclohexanona, se escoge el Acero Inoxidable AISI 304-L, que es resistente a todo tipo de corrosión. En este caso, debido al carácter comburente del peróxido de hidrógeno, tiene aún más sentido que en el caso de la ciclohexanona, aunque no sea tampoco extremadamente oxidante como para verse obligado a utilizar el acero inoxidable sin ninguna otra alternativa. En cualquier caso, se decide escoger este acero, porque los otros tanques también están construidos de este material, dándoles de esta manera versatilidad, y la posibilidad de poderse utilizar para otros compuestos si se diera el caso.

11.1.3.6. Espesor de los tanques

Procediendo de la misma manera que en el apartado 11.1.2.6., se calculan los espesores de los tanques de almacenamiento de peróxido de hidrógeno. Los resultados se adjuntan en la Tabla 11.1.3.3. Cabe añadir, que en este caso, el espesor del fondo inferior, no se calculará como la suma de 6,5 mm más el factor de seguridad de corrosión, 1,5 mm, sino que tendrá el mismo espesor que la parte cilíndrica, es decir, 9 mm.



Tabla 11.1.3.3.- Parámetros que definen el espesor de los tanques de almacenamiento de peróxido de hidrógeno

S	1068,32 atm
P absoluta operación	1 atm
h líquido	6,28 m
ΔP	0,7261 atm
P para el espesor (P)	2,7261 atm
E	0,85
t cilindro	11,50 mm → 12 mm
t cabezal	5,80 mm → 6 mm
t fondo inferior	12 mm

11.1.3.7. Venteo total para líquidos

Aplicando las ecuaciones explicadas en el apartado 11.1.2.7., se ha podido diseñar el venteo total para líquidos en el caso de los tanques de almacenamiento de peróxido de hidrógeno. Los resultados están recogidos en la Tabla 11.1.3.4.:

Tabla 11.1.3.4.- Resultados del venteo total para líquidos de los tanques de almacenamiento de peróxido de hidrógeno



A h	185,52 m ²
Q fuego	1,01·10 ⁷ KJ/h
M	34,0147
λ vap	1353,83 KJ/Kg
C venteo	5658,56 m ³ /h

11.1.3.8. Aislamiento

Igual que en casos anteriores, el aislamiento a utilizar será de lana de roca, con un espesor de 50 mm, y que será proporcionado por la empresa Isover. El modelo escogido es el Spintex HP-353.

11.1.3.9. Dimensionamiento del cubeto de retención

El dimensionamiento del cubeto de retención se ha hecho de la misma manera que en el apartado 11.1.2.9., aplicando las ecuaciones explicadas. En la Tabla 11.1.3.5. se pueden observar los resultados obtenidos para el caso del peróxido de hidrógeno.

Tabla 11.1.3.5.- Dimensionamiento del cubeto de retención para el almacenamiento de peróxido de hidrógeno

D total	6,124 m
S tanque	2 m
S cubeto	2,5 m



L cubeto	11,124 m
W cubeto	19,248 m
A ocupada	87,25 m ²
A libre	126,86 m ²
H cubeto	1,97 m
H cubeto sobredimensionada un 15%	2,26 m

11.1.3.10. Peso total del tanque

Para calcular el peso total de cada tanque de almacenamiento de peróxido de hidrógeno también se ha hecho uso de las ecuaciones explicadas en el apartado 11.1.2.10., obteniéndose así, los resultados expuestos en la Tabla 11.1.3.6.

Tabla 11.1.3.6.-Peso de los tanques de almacenamiento de peróxido de hidrógeno

P fondo	2724,51 kg
P cabezal	2729,97 kg
P cilindro	12427,31 kg
P vacío	17881,80 kg
P operativo	230159,39 kg
P agua	195155,70 Kg
Comprobación terreno (P operativo/A fondo)	0,81 kg/cm ² <2 → resistirá



11.1.3.11. Especificaciones de los tanques

A modo de resumen, en la Tabla 11.1.3.7. se adjuntan las especificaciones más importantes calculadas a lo largo de este subapartado respecto a los tanques de almacenamiento de peróxido de hidrógeno.

Tabla 11.1.3.7.- Principales especificaciones de los tanques de almacenamiento de peróxido de hidrógeno

ESPECIFICACIONES	
Tanque	
Número de tanques	2
Volumen diario (m³/día)	88,80
Tiempo stock (días)	4
Temperatura de diseño (ºC)	45
Presión de diseño (atm)	2
Volumen del tanque (m³)	250
Diámetro total del tanque (m)	6,124
Altura total del tanque (m)	9,84
% volumen ocupado (%)	71,04
Material de diseño	Acero Inoxidable AISI 304
Aislante	Lana de roca (50 mm de espesor)
Espesor del tanque (mm)	12
Espesor del cabezal (mm)	6
Espesor del fondo (mm)	12
Capacidad de venteo (m³/h)	5658,56
Peso del tanque operativo (kg)	230159,39
Cubeto	



Longitud (m)	11,124
Anchura (m)	19,248
Altura (m)	2,26

11.1.4. ALMACENAMIENTO DEL AGENTE EXTRACTOR: TOLUENO (T-108)

11.1.4.1. Conceptos previos

- Normativa: El tolueno es un compuesto inflamable, que según la normativa ASME, MIE-APQ-001, se clasifica como subclase A2. El tolueno tiene una temperatura de ebullición de 111°C, un punto de fusión de -95°C, y un flash point a 6°C. Por esta razón se almacenará a una temperatura de 20°C y a presión atmosférica.
- Volumen diario: Teniendo en cuenta que se requiere tolueno como agente extractivo en la purificación de la ciclohexanona oxima, concretamente en la columna de extracción (C-203), se calcula el volumen necesario diario como:

$$V_{diario} = 5,6 \left(\frac{kg}{h} \right) \cdot \frac{m^3}{871,6 \text{ kg}} \cdot \frac{24 \text{ h}}{1 \text{ día}} = 0,16 \frac{m^3}{dia} \quad (\text{Ec. 11.1.46.})$$

Como se puede observar el volumen diario de tolueno requerido es pequeño, cuestionando de esta manera la viabilidad del volumen del tanque de almacenamiento. En cualquier caso, el hecho de que este volumen sea tan pequeño, se debe a que la mayoría del tolueno es recuperado en el proceso en la columna (C-204 y C-205), siendo recirculado; es decir, las pérdidas de tolueno son pequeñas. Por este motivo, se decide que el tanque de almacenamiento deberá contener



como mínimo el volumen de tolueno necesario para la puesta en marcha.

$$V_{puesta\ en\ marcha} = 15000\ Kg \cdot \frac{m^3}{871,6\ kg} = 17,21\ m^3 \quad (\text{Ec. 11. 1. 47.})$$

- Tiempo de “stock”: En este caso, el concepto de stock no tiene exactamente sentido. Al tener un tanque de un volumen considerable respecto a las necesidades diarias de tolueno, lo que se hará es calcular con qué frecuencia se vaciará el tanque de almacenamiento de tolueno y cada cuento tiempo deberá ser repuesto. Remarcar, que teniendo en cuenta el volumen necesario para la puesta en marcha, se decide que el tanque de almacenamiento sea de 20 m³.

$$t_{llenado} = 20\ m^3 \cdot \frac{\text{día}}{0,16\ m^3} = 125\ días \cdot \frac{1\ mes}{30,4\ días} = 4,1\ meses \rightarrow$$

$$t_{llenado} = \frac{20m^3}{4\ meses} \quad (\text{Ec. 11. 1. 48.})$$

De la misma manera que la ciclohexanona, el tolueno llegará a la planta de producción de ε-caprolactama mediante camiones. Éstos serán de 30 m³. Como se acaba de estimar se necesitará llenar el tanque de almacenamiento de tolueno con capacidad de 20 m³ una vez cada 4 meses; por lo tanto, habrá una entrada de un camión de 30 m³ llenos de tolueno una vez cada 4 meses.

11.1.4.2. Número de tanques necesarios

Siguiendo el protocolo del apartado 11.1.1.2. se calcula el número de tanques. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 11.1.4.1.:



Tabla 11.1.4.1.- Resultados para el cálculo del número de tanque para el almacenamiento de tolueno

V stock	17,21 m³
V stock sobredimensionado	19,79 m³
V tanque	20 m³
N tanques	0,98≈1 tanque
% volumen ocupado	86,05 %

11.1.4.3. Dimensionamiento de los tanques

Los resultados del dimensionamiento de los tanques se encuentran recogidos en la Tabla 11.1.4.2.; los cuales han sido calculados de la misma manera que en el apartado 11.1.1.3.

Tabla 11.1.4.2.- Dimensionamiento de los tanques de almacenamiento de tolueno

Diámetro interno	2 m
V cabezal	2,09 m³
V cilindro	17,91 m³
h cilindro	5,70 m
h cabezal	1 m
h tanque	6,70 m



11.1.4.4. Condiciones para el diseño mecánico de los tanques

Ya se ha comentado en los aspectos previos que el tolueno, al ser una sustancia inflamable, se rige por la normativa ASME, concretamente, ITC MIE-APQ001. También se ha comentado que el tolueno se puede almacenar a una temperatura de 20°C, por lo tanto, la temperatura de diseño será:

$$T_{diseño} = T_{operación} + 20°C = 20°C + 20°C = 40°C \text{ (Ec. 11. 1. 1.)}$$

En cuanto a la presión de diseño, como este es un tanque con una presión absoluta de operación equivalente a la atmosférica, la presión de diseño se determinará de la siguiente manera:

$$P_d = P_{o \text{ absoluta}} + 1 \text{ atm} = 2 \text{ atm} \text{ (Ec. 11. 1. 3.)}$$

11.1.4.5. Material de los tanques

Para decidir el material de construcción, como se ha dicho en la introducción, y como se ha hecho en apartados anteriores, se ha consultado la guía de la empresa *"Harrington Industrial Plastics"*. En el caso del tolueno, son diversos los materiales categorizados con compatibilidad excelente: acero al carbono, cerámica, acero al inoxidable 304 y 316, titanio y Hastelloy C. De todos ellos se opta por el acero inoxidable AISI 304-L, igual que en casos anteriores.



11.1.4.6. Espesor de los tanques

Procediendo de la misma manera que en el apartado 11.1.2.6., se calculan los espesores de los tanques de almacenamiento de tolueno. Los resultados se adjuntan en la Tabla 11.1.4.3. Cabe añadir, que en este caso, el espesor del fondo sí se ha calculado como la suma de 6,5 mm más el factor de seguridad de corrosión, 1,5 mm, igual que en el caso de la ciclohexanona. Se ha hecho así, ya que el grosor del tanque era inferior a éste valor, y como bien se ha explicado antes, es recomendable, por seguridad, que el fondo del tanque tenga como mínimo este espesor.

Tabla 11.1.4.3.- Parámetros que definen el espesor de los tanques de almacenamiento de tolueno

S	1068,32 atm
P operación	1 atm
h líquido	5,48 m
ΔP	0,4620 atm
P para el espesor	2,4620 atm
E	0,85
t cilindro	5,21 mm → 6 mm
t cabezal	3,6 mm → 4mm
t fondo inferior	8 mm



11.1.4.7. Venteo total para líquidos

Aplicando las ecuaciones explicadas en el apartado 11.1.1.7., se ha podido diseñar el venteo total para líquidos en el caso de los tanques de almacenamiento de peróxido de hidrógeno. Los resultados están recogidos en la Tabla 11.1.4.4.:

Tabla 11.1.4.4.- Resultados del venteo total para líquidos de los tanques de almacenamiento de tolueno

A h	42,10 m ²
Q fuego	2,3·10 ⁶ KJ/h
M	92,14
λ vap	360,43 KJ/Kg
C venteo	2934,37 m ³ /h

11.1.4.8. Aislamiento

Igual que en casos anteriores, el aislamiento a utilizar será de lana de roca, con un espesor de 50 mm, y que será proporcionado por la empresa Isover. El modelo escogido es el Spintex HP-353.



11.1.4.9. Dimensionamiento del cubeto de retención

El dimensionamiento del cubeto de retención se ha hecho de la misma manera que en el apartado 11.1.1.9., aplicando las ecuaciones explicadas. En la Tabla 11.1.4.5. se pueden observar los resultados obtenidos para el caso del peróxido de hidrógeno. En este caso el área ocupada se calculará con la ecuación 11.1.49.

$$A_{ocupada} = \frac{\pi}{4} \cdot N \cdot D_{total}^2 \quad (\text{Ec. 11. 1. 49.})$$

Tabla 11.1.4.5.- Dimensionamiento del cubeto de retención para el almacenamiento de tolueno

D total	2,112 m
S tanque	2 m
S cubeto	2,5 m
L cubeto	5,056 m
W cubeto	11,224 m
A ocupada	3,50 m ²
A libre	53,25 m ²
H cubeto	0,38 m
H cubeto sobredimensionada un 15%	0,43 m



11.1.4.10. Peso total del tanque

Para calcular el peso total de cada tanque de almacenamiento de peróxido de hidrógeno también se ha hecho uso de las ecuaciones explicadas en el apartado 11.1.1.10., obteniéndose así, los resultados expuestos en la Tabla 11.1.4.6.

Tabla 11.1.4.6.-Peso de los tanques de almacenamiento de tolueno

P fondo	201,82 kg
P cabezal	202,62 kg
P cilindro	1725,53 kg
P vacío	2129,70 kg
P operativo	17130,20 kg
P agua	19308,72
Comprobación terreno (P operativo/A fondo)	0,54 kg/cm² <2 → resistirá

11.1.4.11. Especificaciones de los tanques



A modo de resumen, en la Tabla 11.1.4.7. se adjuntan las especificaciones más importantes calculadas a lo largo de este subapartado respecto a los tanques de almacenamiento de peróxido de hidrógeno.

Tabla 11.1.4.7.- Principales especificaciones de los tanques de almacenamiento de tolueno

ESPECIFICACIONES	
Tanque	
Número de tanques	4
Volumen diario (m³/día)	0,16
Volumen puesta en marcha (m³)	17,21
Temperatura de diseño (°C)	45
Presión de diseño (atm)	2
Volumen del tanque (m³)	20
Diámetro total del tanque (m)	4,114
Altura total del tanque (m)	6,70
% volumen ocupado (%)	86,05
Material de diseño	Acero Inoxidable AISI 304
Aislante	Lana de roca (50 mm de espesor)
Espesor del tanque (mm)	6
Espesor del cabezal (mm)	4
Espesor del fondo (mm)	8
Capacidad de venteo (m³/h)	2934,37
Peso del tanque operativo (kg)	17130,20 Kg
Cubeto	
Longitud (m)	5,056
Anchura (m)	11,224
Altura (m)	0,43



11.1.5. ALMACENAMIENTO DE MATERIAS PRIMERAS: TERC-BUTANOL

11.1.5.1. Conceptos previos

- Normativa: El terc-butanol es un compuesto inflamable, que según la normativa ASME, MIE-APQ-001, se clasifica como subclase A2. El terc-butanol tiene una temperatura de ebullición de 83°C, un punto de fusión de 25°C, y un flash point a 11°C. Debido a sus propiedades, su almacenamiento será un poco más complicado que en los casos anteriores. El terc-butanol, sí que se almacenará a presión atmosférica, pero debido a su punto de fusión, se almacenará a una temperatura de 30°C. Además, el tanque estará provisto de una camisa que se activará cuando la temperatura descienda a menos de 28°C.
- Volumen diario: Teniendo en cuenta que se requiere terc-butanol como reactivo en la reacción de amoximación, concretamente en el reactor (R-201), se calcula el volumen necesario diario como:

$$V_{diario} = 0,0282 \left(\frac{kg}{h} \right) \cdot \frac{m^3}{780 \text{ kg}} \cdot \frac{24 \text{ h}}{1 \text{ día}} = 8,68 \cdot 10^{-4} \frac{m^3}{\text{dia}} \quad (\text{Ec 11.1.50})$$

Como se puede observar el volumen diario de terc-butanol requerido es muy pequeño, de hecho, se considera que este será inapreciable en periodos de tiempo relativamente cortos. En cualquier caso, el hecho de que este volumen sea tan pequeño, se debe a que la



mayoría del terc-butanol es recuperado en el proceso en la columna (C-201, C-202), siendo recirculado; es decir, las pérdidas de terc-butanol son pequeñas. Por esto motivo, se decide que el tanque de almacenamiento deberá contener como mínimo el volumen de terc-butanol necesario para la puesta en marcha, pero que en cualquier caso, no habrá una inyección continua de este reactivo, sino que en la parada anual de la planta, se volverá añadir, compensando las pérdidas.

$$V_{puesta\ en\ marcha} = 17131,16\ Kg \cdot \frac{m^3}{780\ kg} = 21,96\ m^3 \text{ (Ec. 11. 1. 51.)}$$

- Tiempo de “stock”: En este caso, el concepto de stock no tiene sentido como tal. Al tener un tanque de un volumen considerable respecto a las necesidades diarias de terc-butanol, lo que se hará es calcular con qué frecuencia se vaciará el tanque de almacenamiento y cada cuento tiempo deberá ser repuesto. Remarcando, que teniendo en cuenta el volumen necesario para la puesta en marcha, se decide que el tanque de almacenamiento sea de $22\ m^3$.

$$t_{llenado} = 22\ m^3 \cdot \frac{\text{día}}{8,68 \cdot 10^{-4}\ m^3} = 25345,62\ \text{días} \cdot \frac{1\ mes}{30,4\ \text{días}} = \\ 833,74\ \text{meses} \cdot \frac{1\ año}{12\ \text{mesos}} = 69\ años\ y\ 6\ meses \text{ (Ec. 11. 1. 52.)}$$

Este número reafirma la decisión de no reponer las pérdidas de terc-butanol de manera diaria, sino al hacer la parada anual de la planta. Por lo tanto, vendrá un camión al año con antelación suficiente a la parada anual y a su puesta en marcha posterior. Por lo tanto, todos los controles de nivel y el control de temperatura que requieren este tanque.



11.1.5.2. Número de tanques necesarios

Siguiendo el protocolo del apartado 11.1.1.2. se calcula el número de tanques.

Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 11.1.5.1.:

Tabla 11.1.5.1.- Resultados para el cálculo del número de tanque para el almacenamiento de terc-butanol

V stock	21,96 m³
V stock sobredimensionado	25,25 m³
V tanque	25 m³
N tanques	1,01≈1 tanque
% volumen ocupado	87,84 %

11.1.5.3. Dimensionamiento de los tanques

Los resultados del dimensionamiento de los tanques se encuentran recogidos en la Tabla 11.1.4.2.; los cuales han sido calculados de la misma manera que en el apartado 11.1.1.3.

Tabla 11.1.5.2.- Dimensionamiento de los tanques de almacenamiento de terc-butanol



Diámetro interno	2 m
V cabezal	2,09 m ³
V cilindro	22,91 m ³
h cilindro	7,29 m
h cabezal	1 m
h tanque	8,29 m

11.1.5.4. Condiciones para el diseño mecánico de los tanques

Ya se ha comentado en los aspectos previos que el tolueno, al ser una sustancia inflamable, se rige por la normativa ASME, concretamente, ITC MIE-APQ001. También se ha comentado que el tolueno se puede almacenar a una temperatura de 20°C, por lo tanto, la temperatura de diseño será:

$$T_{diseño} = T_{operación} + 20°C = 30°C + 20°C = 50°C \quad (\text{Ec. 11.1.1.})$$

En cuanto a la presión de diseño, como este es un tanque con una presión absoluta de operación equivalente a la atmosférica, la presión de diseño se determinará de la siguiente manera:

$$P_d = P_{o \text{ absoluta}} + 1 \text{ atm} = 2 \text{ atm} \quad (\text{Ec. 11.1.3.})$$

11.1.5.5. Material de los tanques



Para decidir el material de construcción, como se ha dicho en la introducción, y como se ha hecho en apartados anteriores, se ha consultado la guía de la empresa *"Harrington Industrial Plastics"*. Este compuesto no está incluido en dicha guía. Se hace recerca bibliográfica, y se comprueba que dicho compuesto no es corrosivo, si más no, no en un grado a tener en cuenta. A pesar de todo, se opta por el acero inoxidable AISI 304-L, igual que en casos anteriores.

11.1.5.6. Espesor de los tanques

Procediendo de la misma manera que en el apartado 11.1.2.6., se calculan los espesores de los tanques de almacenamiento de terc-butanol. Los resultados se adjuntan en la Tabla 11.1.5.3. Cabe añadir, que en este caso, el espesor del fondo sí se ha calculado como la suma de 6,5 mm más el factor de seguridad de corrosión, 1,5 mm, igual que en el caso de la ciclohexanona. Se ha hecho así, ya que el grosor del tanque era inferior a éste valor, y como bien se ha explicado antes, es recomendable, por seguridad, que el fondo del tanque tenga como mínimo este espesor.

Tabla 11.1.5.3.- Parámetros que definen el espesor de los tanques de almacenamiento de terc-butanol

S	1068,32 atm
P operación	1 atm
h líquido	6,99 m
ΔP	0,5240 atm
P para el espesor	2,5240 atm
E	0,85
t cilindro	5,27 mm → 6 mm



t cabezal	3,6 mm → 4mm
t fondo inferior	8 mm

11.1.5.7. Venteo total para líquidos

Aplicando las ecuaciones explicadas en el apartado 11.1.1.7., se ha podido diseñar el venteo total para líquidos en el caso de los tanques de almacenamiento de peróxido de hidrógeno. Los resultados están recogidos en la Tabla 11.1.4.4.:

Tabla 11.1.5.4.- Resultados del venteo total para líquidos de los tanques de almacenamiento de terc butanol

A h	52,09 m ²
Q fuego	$3,57 \cdot 10^6$ KJ/h
M	74,12
λ vap	511,33 KJ/Kg
C venteo	3582,00 m ³ /h

11.1.5.8. Aislamiento

Igual que en casos anteriores, el aislamiento a utilizar será de lana de roca, con un espesor de 50 mm, y que será proporcionado por la empresa Isover. El modelo escogido es el Spintex HP-353.

11.1.5.9. Dimensionamiento del cubeto de retención



El dimensionamiento del cubeto de retención se ha hecho de la misma manera que en el apartado 11.1.1.9., aplicando las ecuaciones explicadas. En la Tabla 11.1.5.5. se pueden observar los resultados obtenidos para el caso del terc-butanol. En este caso el área ocupada se calculará con la ecuación 11.1.3.Z

$$A_{ocupada} = \frac{\pi}{4} \cdot N \cdot D_{total}^2 \quad (\text{Ec. 11. 1. 3.})$$

Tabla 11.1.5.5.- Dimensionamiento del cubeto de retención para el almacenamiento de terc butanol

D total	2,124 m
S tanque	2 m
S cubeto	2,5 m
L cubeto	5,056 m
W cubeto	11,248 m
A ocupada	3,54 m²
A libre	53,33 m²
H cubeto	0,47 m
H cubeto sobredimensionada un 15%	0,54 m

11.1.5.10. Peso total del tanque



Para calcular el peso total de cada tanque de almacenamiento de terc butanol también se ha hecho uso de las ecuaciones explicadas en el apartado 11.1.1.10., obteniéndose así, los resultados expuestos en la Tabla 11.1.5.6.

Tabla 11.1.5.6.-Peso de los tanques de almacenamiento de terc butanol

P fondo	201,82 kg
P cabezal	304,54 kg
P cilindro	4414,37 kg
P vacío	4920,73 kg
P operativo	21939,73 kg
P agua	26841,20 kg
Comprobación terreno (P operativo/A fondo)	0,077 kg/cm ² <2 → resistirá

11.1.5.11. Sistema de seguridad calefactor o media caña

Como ya se ha dicho en los aspectos previos, el terc-butanol solidifica a una temperatura de 25ºC, es por eso que se almacena a una temperatura de 30ºC. Para mantener el tanque a esta temperatura, especialmente en los periodos invernales, en los que las temperaturas ambientales son considerablemente menores a las 30ºC.

Esta media caña, por el que circulará agua como caudal refrigerante, tendrá como objetivo mantener el terc-butanol a dicha temperatura. El consumo de agua de



refrigerante no será elevado, porque en el tanque sólo se mantendrá terc-butanol en la puesta en marcha inicial y posterior a cada parada anual.

Para diseñar la media caña, el primer paso es determinar el calor que se pierde por convección natural en ausencia de éste con el ambiente. Para hacerlo se tendrá en cuenta como temperatura la más desfavorable, que se considerará que es la temperatura mínima histórica; es decir, una temperatura de -5°C.

$$\frac{1}{U_a} = \frac{1}{h_i} + \frac{t_{acero}}{k_{material} \cdot \frac{D_m}{D_i}} + \frac{t_{aislante}}{k_{aislante} \cdot \frac{D_{lana}}{D_i}} \quad (\text{Ec. 11.1.53.})$$

Dónde:

- U_a , coeficiente global de transferencia de calor, o las pérdidas con el ambiente en $\text{W/m}^2 \cdot \text{K}$
- h_i , coeficiente de calor por convección con el aire en $\text{W/m}^2 \cdot \text{K}$
- t_{acero} , espesor del cilindro en m
- $t_{aislante}$, espesor del aislante en m
- D_i , diámetro interno del cilindro en m
- D_e , diámetro externo del cilindro en m
- D_m , diámetro teniendo en cuenta el espesor del acero en m
- D_{lana} , diámetro teniendo en cuenta el espesor del metal y de la lana de roca (aislante) en m
- $k_{material}$, conductividad térmica del material (ASI 304-L) en $\text{W/m} \cdot \text{K}$
- $k_{aislante}$, conductividad térmica del aislante (Spintex HP-353) en $\text{W/m} \cdot \text{K}$

Substituyendo, se encuentra el valor del factor global de transmisión de calor con el ambiente:



$$\frac{1}{U_a} = \frac{1}{25} + \frac{0,006}{15 \cdot \frac{2,012}{2}} + \frac{0,05}{0,04 \cdot \frac{2,112}{2}} \rightarrow U_a = 0,8169 \frac{W}{m^2 \cdot K}$$

A continuación, ya se puede calcular el área total de intercambio de calor, la cual será la suma del área lateral más la de los fondos:

$$A_{total} = A_{lateral} + 2 \cdot A_{fondo} = \pi \cdot D_i \cdot H_{tanque} + 2 \cdot \left(\frac{\pi}{4} \cdot D_i^2 \right) \quad (\text{Ec. 11. 1. 54.})$$

$$A_{total} = \pi \cdot 2 \cdot 8,29 + 2 \cdot \left(\frac{\pi}{4} \cdot 2^2 \right) = 58,37 \text{ m}^2$$

Ahora ya se puede calcular el calor total que debe ser intercambiado:

$$q = U_a \cdot A_{total} \cdot \Delta T = U_a \cdot A_{total} \cdot (T_{tanque} - T_{ambiente}) \quad (\text{Ec. 11. 1. 55.})$$

$$\begin{aligned} q &= 0,8169 \cdot 58,37 \cdot ((30 + 273) - (-5 + 273)) \\ &= 1668,89 \text{ W} \cdot \frac{1 \text{ KW}}{1000 \text{ W}} \cdot \frac{1 \text{ KJ/s}}{1 \text{ KW}} \cdot \frac{3600 \text{ s}}{1 \text{ h}} = 6007,99 \text{ kJ/h} \end{aligned}$$

Una vez se sabe el calor que se debe eliminar, se calcula el caudal de agua que será necesario para ello:

$$q = m \cdot C_p \cdot \Delta T \quad (\text{Ec. 11. 1. 56.})$$

Dónde:

- C_p , es el calor específico del agua (J/Kg·°C)



- ΔT , incremento de temperatura del aceite térmico
- m , caudal másico de agua refrigerante (kg/s)

Para calentar se utilizará agua de la entrada de torre de refrigeración a 45°C, y se hará que tenga un salto térmico de 5°C; es decir, que abandone el serpentín a una temperatura de 40°C. Una vez el agua pase por el serpentín volverá al circuito cerrado de servicios, a la torre de refrigeración correspondiente. Hay que tener en cuenta que el tanque de terc-butanol sólo está operativo en las puestas en marcha.

Substituyendo y aislando el caudal de refrigerante:

$$6007,99 = m \cdot 4,18 \cdot (318 - 313)K \rightarrow m = 287,46 \text{ kg/h}$$

Se convierte el caudal másico de agua refrigerante a volumétrico:

$$287,46 \frac{\text{kg}}{\text{h}} \cdot \frac{\text{m}^3}{992,2 \text{ kg}} = 0,29 \frac{\text{m}^3}{\text{h}}$$

Se debe calcular el diámetro de la media caña. Para hacerlo, se supone una velocidad de circulación del fluido de 1,5 m/s.

$$D_{caña} = \sqrt{\frac{8 \cdot Q_v}{v_f \cdot \pi}} \quad (\text{Ec. 11.1.57.})$$

Dónde:

- $D_{caña}$, es el diámetro de la media caña en metros
- Q_v , es el caudal volumétrico de refrigerante necesario en m^3/s
- v_f , es la velocidad del fluido en m/s



Substituyendo:

$$D_{caña} = \sqrt{\frac{8 \cdot 0,29 \frac{m^3}{h} \cdot \frac{1h}{3600s}}{1,5 \cdot \pi}} = 0,012 \text{ m}$$

A continuación ya se pueden calcular las dimensiones que deberá tener el serpentín. Primero de todo, se determina el área de intercambio que debe tener este:

$$q = U \cdot A \cdot DTML \quad (\text{Ec. 11. 1. 58.})$$

DTML, es el incremento de temperatura medio logarítmico, y se calcula como:

$$DTML = \frac{(T_E) - (T_S)}{\ln \left(\frac{(T_E - T)}{(T_S - T)} \right)} \quad (\text{Ec. 11. 1. 59.})$$

Dónde:

- T, es la temperatura que se quiere mantener en °C
- TE, es la temperatura de entrada del agua refrigerante en °C
- TS, es la temperatura de salida del agua refrigerante en °C

Substituyendo:

$$DTML = \frac{45 - 40}{\ln \left(\frac{(45-30)}{(40-30)} \right)} = 12,33$$



Se debe tener en cuenta que el calor intercambiado debe ser el mismo que el calculado anteriormente, y que el coeficiente global, en este caso, varía, porque ahora no se hace referencia a la convección, sino a la transferencia de calor entre el serpentín y el fluido de dentro del tanque, el terc-butanol. Se han buscado valores típicos en la bibliografía para serpentines, y para casos donde se tenga terc-butanol como fluido de proceso y agua como fluido refrigerante, se recomienda un valor de 200 W/m²·°C.

Ahora ya se puede substituir y aislando, será posible encontrar el área de intercambio necesaria:

$$6007,99 \frac{KJ}{h} = 200 \cdot A \cdot 12,33 \rightarrow A_{intercambio} = 2,44 \text{ m}^2$$

Si se sobredimensiona un 15%:

$$A_{intercambio} = 1,15 \cdot 2,44 = 2,80 \text{ m}^2$$

Por lo tanto, el área que debe tener el serpentín, es de 2,80 m². Esta superficie debe ser suficiente para rodear todo el líquido, ya que de lo contrario, no se alcanzaría la temperatura deseada alrededor del serpentín.

Se calcula el área que tiene una vuelta de la media caña:

$$A_{vuelta} = 2 \cdot \pi \cdot r_{tanque} \cdot D_{caña} \quad (\text{Ec. 11.1.60.})$$

$$A_{vuelta} = 2 \cdot \pi \cdot 1 \cdot 0,012 = 0,075 \text{ m}^2$$

También es importante saber el número de vueltas:



$$n^{\circ} \text{ vueltas} = \frac{A_{\text{total intercambio}}}{A_{\text{vuelta}}} = \frac{2,80}{0,075} = 37,33 \rightarrow 38 \text{ vueltas}$$

Por último, para tener bien dimensionada la media caña, es necesario conocer la altura de esta:

$$H_{\text{caña}} = (n^{\circ} \text{ vueltas} - 1) \cdot 0,1 + (D_{\text{caña}} \cdot n^{\circ} \text{ vueltas}) \quad (\text{Ec. 11.1.61.})$$

$$H_{\text{caña}} = (38 - 1) \cdot 0,1 + (0,012 \cdot 38) = 4,156 \text{ m}$$

11.1.5.12. Especificaciones de los tanques

A modo de resumen, en la Tabla 11.1.5.9. se adjuntan las especificaciones más importantes calculadas a lo largo de este subapartado respecto a los tanques de almacenamiento de peróxido de hidrógeno.

Tabla 11.1.5.8.- Principales especificaciones de los tanques de almacenamiento de terc butanol

ESPECIFICACIONES	
Tanque	
Número de tanques	1
Volumen diario (m ³ /día)	8,68·10 ⁻⁴
Tiempo stock (días)	-
Temperatura de diseño (°C)	50



Presión de diseño (atm)	2
Volumen del tanque (m ³)	22
Diámetro total del tanque (m)	2,124
Altura total del tanque (m)	8,29
% volumen ocupado (%)	87,84%
Material de diseño	Acero Inoxidable AISI 304-L
Aislante	Lana de roca (50 mm de espesor)
Espesor del tanque (mm)	6
Espesor del cabezal (mm)	4
Espeso del fondo (mm)	8
Capacidad de venteo (m ³ /h)	3582,00
Peso del tanque operativo (kg)	21939,73 Kg
Cubeto	
Longitud (m)	5,056
Anchura (m)	11,248
Altura (m)	0,54

11.1.6. ALMACENAMIENTO DE MATERIAS PRIMERAS: ÓLEUM (T-110 A T-112)

11.1.6.1. Conceptos previos



- Normativa: El óleum es un compuesto muy corrosivo y comburente, y está recogido bajo la normativa ASME, MIE-APQ-006. La mezcla de óleum a almacenar se compone del 71% de ácido sulfúrico y el resto trióxido de azufre. A esta composición tiene una temperatura de ebullición de 60°C y un punto de fusión de 5°C. Por esta razón se almacenará a temperatura ambiente, 20°C, y a presión atmosférica.
- Volumen diario: El óleum se utiliza como reactivo para hacer la transformación de Beckmann a la ciclohexanona oxima, y obtener así crudo de caprolactama en los reactores R-301, R-302 y R-303, aunque sólo será inyectado en el primero de ellos. Se calcula el volumen necesario diario:

$$V_{diario} = 6210 \left(\frac{kg}{h} \right) \cdot \frac{m^3}{1990 \text{ kg}} \cdot \frac{24 \text{ h}}{1 \text{ día}} = 125,24 \frac{m^3}{dia} \text{ (Ec. 11. 1. 62.)}$$

- Tiempo de “stock”: Para dimensionar los tanques de almacenamiento de óleum, se ha fijado un tiempo de residencia en la planta (tiempo de “stock”) de 4 días. De la misma manera que la ciclohexanona y el peróxido de hidrógeno, el óleum llegará a la planta de producción de ε-caprolactama mediante camiones. Éstos serán de 30 m³. Teniendo en cuenta el requerimiento diario calculado con la ecuación 11.1.61., se deduce que se necesitaran entre 4 y 5 camiones al día. Suponiendo que en un día laboral ordinario pueden llegar camiones durante 12 horas (de 8 de la mañana a 20 de la tarde), llegará un camión con óleum cada 3 horas los días que se requieran 4 camiones. Recordar que un aumento del tiempo de “stock” en la planta supondría un aumento del volumen de los tanques, lo cual podría causar un problema de espacio en la planta.



11.1.6.2. Número de tanques necesarios

Siguiendo el protocolo del apartado 11.1.2.2. se calcula el número de tanques.

Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 11.1.6.1.:

Tabla 11.1.6.1.- Resultados para el cálculo del número de tanque para el almacenamiento de óleum

V stock	500,97 m³
V stock sobredimensionado	576,12 m³
V tanque	250 m³
N tanques	2,3≈3 tanques
% volumen ocupado	66,80%

11.1.6.3. Dimensionamiento de los tanques

Los resultados del dimensionamiento de los tanques se encuentran recogidos en la Tabla 11.1.6.2.; los cuales han sido calculados de la misma manera que en el apartado 11.1.2.3.

Tabla 11.1.6.2.- Dimensionamiento de los tanques de almacenamiento de óleum

V cabezal	56,55 m³
V cilindro	193,45 m³
h cilindro	6,84 m
h tanque	9,84 m



11.1.6.4. Condiciones para el diseño mecánico de los tanques

Ya se ha comentado en los aspectos previos que el óleum, al ser una sustancia comburente y oxidante, se rige por la normativa ASME, concretamente, ITC MIE-APQ006. También se ha comentado que el óleum se puede almacenar a una temperatura de 25°C, por lo tanto, la temperatura de diseño será:

$$T_{diseño} = T_{operación} + 20°C = 25°C + 20°C = 45°C \text{ (Ec. 11. 1. 1.)}$$

En cuanto a la presión de diseño, como en casos anteriores, al tratarse de un tanque a presión atmosférica, ésta se calculará como:

$$P_d = P_{o \text{ absoluta}} + 1 \text{ atm} = 2 \text{ atm} \text{ (Ec. 11. 1. 3.)}$$

11.1.6.5. Material de los tanques

Para decidir el material de construcción, como se ha dicho en la introducción, y como se ha hecho en apartados anteriores, se ha consultado la guía de la empresa “*Harrington Industrial Plastics*”. En el caso del óleum, igual que en el caso del amoníaco anhidro, al ser sustancias muy corrosivas, el material que está clasificado con compatibilidad excelente el Acero Inoxidable AISI 304-L. Consultando otras fuentes bibliográficas se observa que el tipo de acero más utilizado para almacenar este material es el Acero Inoxidable AISI 316-L. Como ya se ha comentado, todos los tanques estarán hechos de dicho material, dándoles de esta manera versatilidad a los tanques de almacenamiento, y la posibilidad de poderse utilizar para otros compuestos si se diera el caso.



11.1.6.6. Espesor de los tanques

Procediendo de la misma manera que en el apartado 11.1.2.6., se calculan los espesores de los tanques de almacenamiento de óleum. Los resultados se adjuntan en la Tabla 11.1.6.3. Cabe añadir, que en este caso, el espesor del fondo tampoco se calculará como la suma de 6,5 mm más el factor de seguridad de corrosión, 1,5 mm, ya que como se observa en la Tabla 11.1.6.3., el espesor de la parte cilíndrica es mayor.

Tabla 11.1.6.3.- Parámetros que definen el espesor de los tanques de almacenamiento de óleum

S	1068,32 atm
P diseño	2 atm
h líquido	5,91 m
ΔP	0,6798 atm
P para espesor	0,6798 atm
E	0,85
t cilindro	11,34 mm → 12 mm
t cabezal	5,80 mm → 6 mm
t fondo inferior	12 mm

11.1.6.7. Venteo total para líquidos



Aplicando la misma metodología explicada en el apartado 11.1.2.7., se ha podido diseñar el venteo total para líquidos en el caso de los tanques de almacenamiento de óleum. Los resultados están recogidos en la Tabla 11.1.6.4.:

Tabla 11.1.4.6.- Resultados del venteo total para líquidos de los tanques de almacenamiento de tolueno

A h	185,52 m²
Q fuego	1,01·10⁷ KJ/h
M	92,85
λ vap	176,09 KJ/Kg
C venteo	26331,47 m³/h

Se cree necesario añadir, que debido a la posibilidad de que el trióxido de azufre se volatilice, se incluirá un scrubber de sosa a la salida del venteo. El trióxido de azufre es un importante contaminante, además de tóxico, para la atmósfera. Es esta la razón, de incluir un scrubber de sosa.

11.1.6.8. Aislamiento

Igual que en casos anteriores, el aislamiento a utilizar será de lana de roca, con un espesor de 50 mm, y que será proporcionado por la empresa Isover. El modelo escogido es el Spintex HP-353.

11.1.6.9. Dimensionamiento del cubeto de retención



El dimensionamiento del cubeto de retención se ha hecho de la misma manera que en el apartado 11.1.1.9., aplicando las ecuaciones explicadas. En la Tabla 11.1.6.5. se pueden observar los resultados obtenidos para el caso del peróxido de hidrógeno.

Tabla 11.1.6.5.- Dimensionamiento del cubeto de retención para el almacenamiento de óleum

D total	6,124 m
S tanque	2 m
S cubeto	2,5 m
L cubeto	15,186 m
W cubeto	19,248 m
A ocupada	145,13 m ²
A libre	147,17 m ²
H cubeto	1,70 m
H cubeto sobredimensionada un 15%	1,95 m

11.1.6.10. Peso total del tanque

Para calcular el peso total de cada tanque de almacenamiento de óleum también se ha hecho uso de las ecuaciones explicadas en el apartado 11.1.2.10., obteniéndose así, los resultados expuestos en la Tabla 11.1.6.6.



Tabla 11.1.6.6.-Peso de los tanques de almacenamiento de óleum

P fondo	2724,51 kg
P cabezal	2729,97 kg
P cilindro	12427,31 kg
P vacío	17881,80 kg
P operativo	216601,80 kg
P agua	184572,81 Kg
Comprobación terreno (P operativo/A fondo)	0,77 kg/cm² <2 → resistirá

11.1.6.11. Especificaciones de los tanques

A modo de resumen, en la Tabla 11.1.6.7. se adjuntan las especificaciones más importantes calculadas a lo largo de este subapartado respecto a los tanques de almacenamiento de óleum.

Tabla 11.1.6.7.- Principales especificaciones de los tanques de almacenamiento de óleum



ESPECIFICACIONES	
Tanque	
Número de tanques	3
Volumen diario (m ³ /día)	125,24
Tiempo stock (días)	4
Temperatura de diseño (°C)	45
Presión de diseño (atm)	2
Volumen del tanque (m ³)	250
Diámetro total del tanque (m)	6,124
Altura total del tanque (m)	8,62
% volumen ocupado (%)	66,80
Material de diseño	Acero Inoxidable AISI 316-L
Aislante	Lana de roca (50 mm de espesor)
Espesor del tanque (mm)	12
Espesor del cabezal (mm)	6
Espeso del fondo (mm)	12
Capacidad de venteo (m ³ /h)	26331,47
Peso del tanque operativo (kg)	216601,80
Cubeto	
Longitud (m)	15,186
Anchura (m)	19,248
Altura (m)	1,95

11.1.7. ALMACENAMIENTO DEL AGENTE EXTRACTOR: BENCENO (T-113)

11.1.7.1. Conceptos previos

- Normativa: El benceno es un compuesto inflamable. Éste está legislado por la normativa ASME, MIE-APQ-001, y subclasificado como A2. El benceno tiene una temperatura de ebullición de 80,1°C y un punto de fusión de 5,5°C. Se debe tener especial cuidado con el



benceno ya que su flash point tiene un valor de -11,63°C. A pesar de todo, se almacenará a temperatura ambiente (20°C) y presión atmosférica.

- Volumen diario: El benceno se utiliza como agente extractor en la extracción líquido-líquido presente en la purificación de la caprolactama, en el equipo C-501. Se calcula el volumen necesario diario:

$$V_{diario} = 10,27 \left(\frac{kg}{h} \right) \cdot \frac{m^3}{876,5 \text{ kg}} \cdot \frac{24 \text{ h}}{1 \text{ día}} = 0,28 \frac{m^3}{dia} \quad (\text{Ec. 11. 1. 63.})$$

Como se puede observar el volumen diario de benceno requerido es pequeño, cuestionando de esta manera el volumen del tanque de almacenamiento. En cualquier caso, el hecho de que este volumen sea tan pequeño, se debe a que la mayoría del benceno es recuperado en el proceso en la columna (C-502 y C-503), siendo separado del agua en el separador de fases (S-501) y recirculado; es decir, las pérdidas de benceno son pequeñas. Por este motivo, se decide que el tanque de almacenamiento deberá contener como mínimo el volumen de benceno necesario para la puesta en marcha.

$$V_{puesta \text{ en } marcha} = 70000 \text{ Kg} \cdot \frac{m^3}{871,6 \text{ kg}} = 80,31 \text{ m}^3 \quad (\text{Ec. 11. 1. 64.})$$

- Tiempo de “stock”: Igual que en el caso del tolueno, el concepto de stock no tiene exactamente sentido. Al tener un tanque de un volumen considerable respecto a las necesidades diarias de benceno,



lo que se hará es calcular con qué frecuencia se vaciará el tanque de almacenamiento de benceno y cada cuento tiempo deberá ser repuesto. Remarcar, que teniendo en cuenta el volumen necesario para la puesta en marcha, se decide que el tanque de almacenamiento sea de 20 m³.

$$t_{llenado} = 81 \text{ m}^3 \cdot \frac{\text{día}}{0,28 \text{ m}^3} = 289,29 \text{ días} \cdot \frac{1 \text{ mes}}{30,4 \text{ días}} = 9,5 \text{ meses} \rightarrow$$

$$t_{llenado} = \frac{81 \text{ m}^3}{9,5 \text{ meses}} \quad (\text{Ec. 11.1.65})$$

De la misma manera que la ciclohexanona, el tolueno y otros, el benceno llegará a la planta de producción de ε-caprolactama mediante camiones. Éstos serán de 30 m³. Como se acaba de estimar se necesitará llenar el tanque de almacenamiento de benceno con capacidad de 81 m³ una vez cada 9 meses y medio; por lo tanto, habrá una entrada de 3 camiones de 30 m³ (aunque uno no vendrá lleno hasta arriba) llenos de tolueno una vez cada 9 meses y medio.

11.1.7.2. Número de tanques necesarios



Siguiendo el protocolo del apartado 11.1.1.2. se calcula el numero de tanques.

Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 11.1.7.1.:

Tabla 11.1.7.1.- Resultados para el cálculo del número de tanques para el almacenamiento de benceno

V stock	80,31 m ³
V tanque	81 m ³
N tanques	1 tanque
% volumen ocupado	99,14 %

11.1.7.3. Dimensionamiento de los tanques

Los resultados del dimensionamiento de los tanques se encuentran recogidos en la Tabla 11.1.7.2.; los cuales han sido calculados de la misma manera que en el apartado 11.1.2.3.

Tabla 11.1.7.2.- Dimensionamiento de los tanques de almacenamiento de benceno

Diámetro interno	4 m
V cabezal	16,76 m ³
V cilindro	64,24 m ³
h cilindro	5,12 m
h cabezal	2 m



h tanque	7,11 m
-----------------	--------

11.1.7.4. Condiciones para el diseño mecánico de los tanques

Ya se ha comentado en los aspectos previos que el benceno, al ser una sustancia comburente y oxidante, se rige por la normativa ASME, concretamente, ITC MIE-APQ001. También se ha comentado que el benceno se puede almacenar a una temperatura de 25°C, por lo tanto, la temperatura de diseño será:

$$T_{diseño} = T_{operación} + 20°C = 25°C + 20°C = 45°C \text{ (Ec. 11.1.1.)}$$

En cuanto a la presión de diseño, como este es un tanque con una presión absoluta de operación equivalente a la atmosférica, la presión de diseño se determinará de la siguiente manera:

$$P_d = P_{o \text{ absoluta}} + 1 \text{ atm} = 2 \text{ atm} \text{ (Ec. 11.1.3.)}$$

11.1.7.5. Material de los tanques

Para decidir el material de construcción, como se ha dicho en la introducción, y como se ha hecho en apartados anteriores, se ha consultado la guía de la empresa *"Harrington Industrial Plastics"*. En el caso del benceno, los materiales que están clasificados con compatibilidad excelente son el acero al carbono, la cerámica, el titanio, el Acero Inoxidable AISI 304 y el titanio. Como ya se ha comentado, todo los tanques estarán hechos de dicho material, Acero Inoxidable AISI 304-l, dándoles de esta manera versatilidad a los tanques de almacenamiento, y la posibilidad de poderse utilizar para otros compuestos si se diera el caso.



11.1.7.6. Espesor de los tanques

Procediendo de la misma manera que en el apartado 11.1.2.6., se calculan los espesores de los tanques de almacenamiento de benceno. Los resultados se adjuntan en la Tabla 11.1.7.3. Cabe añadir, que en este caso, el espesor del fondo tampoco se calcula como la suma de 6,5 mm más el factor de seguridad de corrosión, 1,5 mm, ya que el espesor obtenido de la parte cilíndrica es superior a este valor.

Tabla 11.1.7.3.- Parámetros que definen el espesor de los tanques de almacenamiento de benceno

S	1068,32 atm
P absoluta de operación	1 atm
h líquido	6,39 m
ΔP	0,5387 atm
P para el espesor	2,5387 atm
E	0,85
t cilindro	8,08 mm → 9 mm
t cabezal	4,70 mm → 5 mm
t fondo inferior	9 mm

11.1.7.7. Venteo total para líquidos



Aplicando las ecuaciones explicadas en el apartado 11.1.2.7., se ha podido diseñar el venteo total para líquidos en el caso de los tanques de almacenamiento de óleum. Los resultados están recogidos en la Tabla 11.1.7.4.:

Tabla 11.1.7.6.- Resultados del venteo total para líquidos de los tanques de almacenamiento de tolueno

A h	89,38 m²
Q fuego	5,56·10⁶ KJ/h
M	78,11
λ vap	391,88 KJ/Kg
C venteo	7088,04 m³/h

11.1.7.8. Aislamiento

Igual que en casos anteriores, el aislamiento a utilizar será de lana de roca, con un espesor de 50 mm, y que será proporcionado por la empresa Isover. El modelo escogido es el Spintex HP-353.



11.1.7.9. Dimensionamiento del cubeto de retención

El dimensionamiento del cubeto de retención se ha hecho de la misma manera que en el apartado 11.1.2.9., aplicando las ecuaciones explicadas. En la Tabla 11.1.7.5. se pueden observar los resultados obtenidos para el caso del peróxido de hidrógeno.

Tabla 11.1.7.5.- Dimensionamiento del cubeto de retención para el almacenamiento de benceno

D total	4,118 m
S tanque	2 m
S cubeto	2,5 m
L cubeto	6,059 m
W cubeto	15,236 m
A ocupada	10,84 m ²
A libre	81,46 m ²
H cubeto	0,99 m
H cubeto sobredimensionada un 15%	1,14 m

11.1.7.10. Peso total del tanque



Para calcular el peso total de cada tanque de almacenamiento de benceno también se ha hecho uso de las ecuaciones explicadas en el apartado 11.1.2.10., obteniéndose así, los resultados expuestos en la Tabla 11.1.7.6.

Tabla 11.1.7.6.-Peso de los tanques de almacenamiento de benceno

P fondo	2724,51 kg
P cabezal	2274,22 kg
P cilindro	6964,46 kg
P vacío	11963,19 kg
P operativo	81961,64 kg
P agua	92128,63
Comprobación terreno (P operativo/A fondo)	0,29 kg/cm ² <2 → resistirá

11.1.7.11. Especificaciones de los tanques

A modo de resumen, en la Tabla 11.1.7.7. se adjuntan las especificaciones más importantes calculadas a lo largo de este subapartado respecto a los tanques de almacenamiento de óleum.



Tabla 11.1.7.7.- Principales especificaciones de los tanques de almacenamiento de benceno

ESPECIFICACIONES	
Tanque	
Número de tanques	1
Volumen diario (m ³ /día)	0,28
Temperatura de diseño (°C)	45
Presión de diseño (atm)	2
Volumen del tanque (m ³)	81
Diámetro total del tanque (m)	4,114
Altura total del tanque (m)	7,11
% volumen ocupado (%)	99,14
Material de diseño	Acero Inoxidable AISI 304
Aislante	Lana de roca (50 mm de espesor)
Espesor del tanque (mm)	9
Espesor del cabezal (mm)	5
Espeso del fondo (mm)	9
Capacidad de venteo (m ³ /h)	7088,04
Peso del tanque operativo (kg)	81961,64
Cubeto	
Longitud (m)	6,059
Anchura (m)	15,236
Altura (m)	1,14

11.1.8. ALMACENAMIENTO DEL SUBPRODUCTO: SULFATO AMÓNICO (T-701 A T-705)

11.1.8.1. Conceptos previos

- Características: El sulfato de amonio obtenido tiene una pureza del 99% en peso, siendo las impurezas de agua, y en menor medida



(0,03%) de ϵ -caprolactama. El sulfato de amonio se almacena ya que se comercializará como fertilizante en base de nitrato o como base para la producción de otros fertilizantes. Éste, aunque es menos higroscópico que las sustancias basadas en nitrato amónico, tiende a apelmazarse, dependiendo de diversos factores como el contenido en agua, la temperatura de almacenamiento inicial y la duración del almacenamiento. De cualquier forma, los cristales de sulfato amónico que no se utilizasen para posteriores procesamientos pueden protegerse del apelmazamiento mediante la aplicación de pequeñas cantidades (<0,2%) de tensioactivos.

El sulfato puede almacenarse en un ambiente normal, sin que se absorba humedad. Sin embargo, puede atraer humedad del aire si la humedad relativa es superior al 80% a 30°C. Cabe añadir que esta capacidad de absorber humedad aumenta significativamente si hay pequeñas cantidades de ácido sulfúrico en el producto; en cualquier caso, no habrá en principio problemas, ya que al añadir un exceso de amónico, se tiene por seguro que todo el ácido sulfúrico será neutralizado.

- Volumen diario: El sulfato de amonio, es un subproducto que se obtiene en la neutralización del ácido sulfúrico con amónico (R-401), en la purificación de la caprolactama. Por tal de poderlo comercializar, se llevan cabo a diferentes operaciones de purificación; concretamente, cristalización (DTB-601 y DTB-602), centrifugación (F-601 y F-602) y secado (D-601 y D-602). Debido a las capacidades de cristalización del cristalizador DTB adquirido, se tiene que dividir la corriente contenedora de sulfato de amonio y purificarlo en paralelo, con dos series de equipos idénticas. El volumen diario de sólido producido (sulfato de amonio más impurezas) es de:



$$V_{diario} = 2 \cdot \left(4241,52 \left(\frac{kg}{h} \right) \cdot \frac{m^3}{1770 \text{ kg}} + 42,84 \left(\frac{kg}{h} \right) \cdot \frac{m^3}{1000 \text{ kg}} + 11,45 \left(\frac{kg}{h} \right) \cdot m^3 \cdot 1020 \text{ kg} \cdot 24 \text{ h} \right) = 117,62 \text{ m}^3/\text{día} \quad (\text{Ec. 11.1.66})$$

- Tiempo de “stock”: Para dimensionar los silos de almacenamiento de sulfato amónico, se ha fijado un tiempo de residencia en la planta (tiempo de “stock”) de 4 días. El transporte del subproducto de sulfato de amonio se hará por carretera, con camiones, es por eso que se han tenido en cuenta y tiempo de stock de 4 días, para prevenir posibles huelgas en el transporte y otro contratiempos. Cabe recordar que un aumento del tiempo de “stock” en la planta supondría un aumento del volumen de los silos, lo cual podría causar un problema de espacio en la planta.

Es necesario saber, que el sulfato de amonio se transportara en big-bags con una capacidad de 2000 kg, de manera que la cantidad necesarias de estas bolsas al día será:

$$N^{\circ} \text{ big-bags} = \frac{Peso_{diario}}{Peso_{big-bag}} = \frac{206198,88}{2000} = 103,1 \\ \rightarrow 104 \frac{\text{big-bags}}{\text{día}} \quad (\text{Ec. 11.1.67})$$

En este caso, el cálculo del número de camiones necesarios cada día, se realiza de manera diferente hasta ahora. Se debe tener en cuenta la capacidad de transportar del camión en peso, y no en volumen, de manera que la cantidad necesaria de camiones diaria será:

$$N^{\circ} \text{ camiones} = \frac{Peso_{diario}}{Peso_{camión}} = \frac{206198,88}{23000} = 8,9 \\ \rightarrow 9 \frac{\text{camiones}}{\text{día}} \quad (\text{Ec. 11.1.68})$$



Es necesario añadir que en un día laboral, los camiones pueden llegar en el período de tiempo que se da entre las 8 horas de la mañana y las 20 horas de la noche; equivaliendo a un total de 12 horas. Teniendo en cuenta esto, a lo largo del día vendrá un camión aproximadamente cada hora y veinte minutos.

11.1.8.2. Número de silos necesarios

Para saber la cantidad de silos necesarios, primero de todo es necesario estimar el volumen de “stock”, teniendo en cuenta el tiempo de “stock” fijado:

$$V_{stock} = 117,62 \frac{m^3}{dia} \cdot 4 dias = 470,48 m^3 \quad (\text{Ec. 11.1.69})$$

Por lo tanto, el volumen de producto sólido (sulfato de amonio + impurezas) que se debe tener almacenado es de $470,48 m^3$.

Además, se decide, por precaución, sobredimensionar el volumen de los tanques un 15%:

$$V_{stock \ sobredimensionado} = 470,48 m^3 \cdot 1,15 = 541,05 m^3 \quad (\text{Ec. 11.1.70})$$

Si se escoge un volumen de silo de $125 m^3$, y teniendo en cuenta el volumen de stock sobredimensionado, se calculan el número de silos necesarios:

$$N_{silos} = \frac{V_{stock \ sobredimensionado}}{V_{silo}} = \frac{541,05 m^3}{125 m^3} = 4,32 \text{ silos}$$
$$\cong 5 \text{ silos} \quad (\text{Ec. 11.1.71})$$



Ahora, se calcula el porcentaje de ocupación de cada silo por el sulfato de amonio:

$$\% \text{ Volumen ocupado} = \frac{\frac{V_{stock}}{N_{silos}}}{V_{silo}} \cdot 100 = \frac{\frac{470,48 \text{ m}^3}{5}}{125 \text{ m}^3} \cdot 100 = 75,28\% \quad (\text{Ec. 11.1.72})$$

11.1.8.3. Dimensionamiento de los tanques

Como ya se ha dicho, el volumen de cada silo será de 125 m^3 . Teniendo en cuenta la forma característica de los silos, y las relaciones recomendadas por la bibliografía, se escoge una relación de altura y diámetro de $1,5$ ($H/D=1,5$). Sabiendo también la proporción de la altura de la parte cónica (Figura 11.1.8.1.) del silo con el diámetro de éste, se dimensiona la parte cilíndrica del silo.

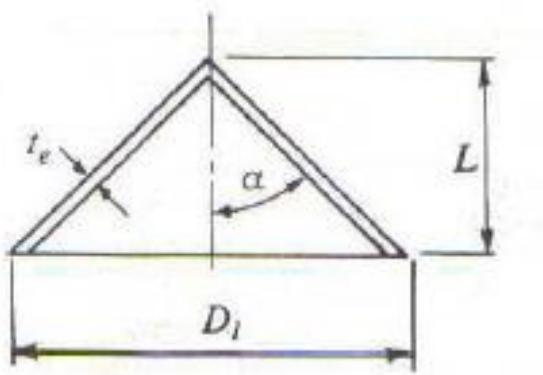


Figura 11.1.8.1.- Esquema del fondo cónico de un silo

$$H_{cilindro} = 1,5 \cdot D_{silo} \quad (\text{Ec. 11.1.73})$$



$$H_{cono} = \frac{D_{silo}}{2 \cdot \tan(\alpha)} = 45^\circ \rightarrow H_{cono} = \frac{D_{silo}}{2} \quad (\text{Ec. 11. 1. 74})$$

Además, es conocido que el volumen real del silo será la suma del volumen de la parte cilíndrica y la parte cónica, tal y como se observa en las ecuaciones 11.1.75. Cabe añadir, que este tipo de estructura de almacenamiento suelen tener un cabezal superior plano. Si se substituyen estas relaciones en las ecuaciones de volumen se obtiene la ecuación 11.1.76., con la cual se podrá calcular el diámetro de silo.

$$V_{silo} = V_{cilindro} + V_{cono} = \\ \left(\frac{\pi}{4} D_{silo}^2 \cdot H_{cilindro} \right) + \left(\frac{\pi}{12} D_{silo}^2 \cdot H_{cono} \right) \quad (\text{Ec. 11. 1. 75})$$

$$V_{silo} = \left(\frac{\pi}{4} D_{silo}^2 \cdot 1,5 \cdot D_{silo} \right) + \left(\frac{\pi}{12} D_{silo}^2 \cdot \frac{D_{silo}}{2} \right) \quad (\text{Ec. 11. 1. 76})$$

Substituyendo y aislando, se encuentra el diámetro que deberá tener el silo:

$$V_{silo} = \left(\frac{\pi}{4} D_{silo}^2 \cdot 1,5 \cdot D_{silo} \right) + \left(\frac{\pi}{12} D_{silo}^2 \cdot \frac{D_{silo}}{2} \right) = 125m^3 \rightarrow D_{silo} = 4,57 m$$

Es necesario especificar, que debido a que el diámetro de estos silos es mayor a los 4metros, estos no podrán ser transportados ya construidos, sino que será necesario construirlos in situ.

A continuación, y substituyendo en las relaciones de altura y diámetro anteriores, se encuentra el valor de las alturas de la parte cilíndrica y cónica del silo:

$$H_{cilindro} = 1,5 \cdot D_{silo} = 1,5 \cdot 4,57 = 6,86 m$$



$$H_{cono} = \frac{D_{silo}}{2} = \frac{4,57}{2} = 2,29m$$

De la misma manera, se pueden calcular el volumen de la parte cónica y cilíndrica del silo.

$$V_{cilindro} = \left(\frac{\pi}{4} D_{silo}^2 \cdot H_{cilindro} \right) = \left(\frac{\pi}{4} \cdot 4,57^2 \cdot 6,86 \right) = 112,52$$

$$V_{cono} = \left(\frac{\pi}{12} D_{silo}^2 \cdot H_{cono} \right) = \left(\frac{\pi}{12} \cdot 4,57^2 \cdot 2,29 \right) = 12,52$$

Finalmente, se estima la altura total del silo, teniendo en cuenta que ésta será la suma de las alturas de la parte cónica y cilíndrica.

$$H_{silo} = H_{cono} + H_{cilindro} = 2,29 + 6,86 = 9,15 \text{ (Ec. 11.1.77)}$$

11.1.8.4. Condiciones para el diseño mecánico de los tanques

Como se ha explicado en los conceptos previos, al no haber grandes problemas relacionados con las condiciones a las que se debe almacenar el sulfato de amonio, este compuesto se mantendrá a temperatura y presión ambientales. De esta manera, se calcula la temperatura de diseño y también la presión de diseño.

$$T_{diseño} = T_{operación} + 20^{\circ}\text{C} = 20^{\circ}\text{C} + 20^{\circ}\text{C} = 40^{\circ}\text{C} \text{ (Ec. 11.1.1.)}$$



$$P_d = P_o \text{ absoluta} + 1 \text{ atm} = 2 \text{ atm} \quad (\text{Ec. 11. 1. 3.})$$

11.1.8.5. Material de los tanques

Igual que en los casos anteriores, también se ha consultado la guía de la empresa “*Harrington Industrial Plastics*”. En este caso, los materiales catalogados con compatibilidad excelente, y por lo tanto son los recomendados por la guía, son el acero al carbono, la cerámica y acero inoxidable. De éstos, debido a los posibles problemas de corrosión se escoge el acero inoxidable, pero en este caso el AISI 316-L.

11.1.8.6. Espesor de los tanques

De la misma manera que en los diseños mecánicos anteriores se sigue la normativa ASME para determinar los espesores requeridos para el silo.

Primero de todo, es importante conocer el límite elástico (S) a la temperatura de almacenamiento. Según la bibliografía consultada, este tiene un valor de:

$$S = 220 \frac{N}{mm^2} = 2,20 \cdot 10^8 Pa = 2171,23 \text{ atm}$$

A continuación ya se puede proceder a dimensionar los espesores de las partes cilíndricas y cónicas del silo con las ecuaciones 11.1.77. y 11.1.78.

$$t_{cilindro} = \frac{P \cdot R_{interno}}{S \cdot E - 0,6 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad (\text{Ec. 11. 1. 78.})$$

$$t_{cono} = \frac{P \cdot R_{interno}}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad (\text{Ec. 11. 1. 79.})$$



Como se puede observar de manera previa, se deben determinar las presiones a tener en cuenta para determinar el espesor. En el caso de la parte cónica ésta será igual a la de diseño; en cambio, en el caso de la parte cilíndrica se deberá tener en cuenta también la ejercida por el sólido. Para ello se debe determinar también la altura de sólido.

$$H_{sólido} = \frac{V_{sólido}}{\frac{\pi}{4} \cdot D_{silo}^2} \quad (\text{Ec. 11. 1. 80.})$$

Substituyendo:

$$H_{sólido} = \frac{94,096}{\frac{\pi}{4} \cdot 4,570^2} = 5,74 \text{ m}$$

Ahora ya se calcula la presión que realiza la columna de sólido.

$$\Delta P = \rho \cdot g \cdot h_{sólido} = 1770 \cdot 9,8 \cdot 5,74 = 99505,76 \text{ Pa} = 0,9820 \text{ atm} \quad (\text{Ec. 11. 1. 4.})$$

Por lo tanto, ya se puede obtener la presión a tener en cuenta para calcular el espesor de la parte cilíndrica.

$$P = \Delta P + P_d = 0,9820 \text{ atm} + 2 \text{ atm} = 2,9820 \text{ atm}$$

Finalmente, ya se pueden obtener los espesores tanto de la parte cónica, como de la cilíndrica.



$$t_{cilindro} = \frac{2,98 \cdot 2285}{2171,23 \cdot 0,85 - 0,6 \cdot 2,98} + 1,5 + C_2 = 5,19 + C_2$$

$$t_{cono} = \frac{2 \cdot 2285}{2 \cdot 2171,23 \cdot 0,85 - 0,2 \cdot 2} + 1,5 + C_2 = 2,74 + C_2$$

Se acepta como una buena aproximación suponer que la tolerancia a la fabricación equivaldrá al 10% del espesor del tanque calculado o $C_2=1\text{mm}$, lo que tenga un valor más grande. De manera que, redondeando al alza, el espesor será:

$$t_{cilindro} = 5,19 + C_2 = 5,19 + 1 = 6,19 \rightarrow 7\text{mm}$$

$$t_{cono} = 2,74 + C_2 = 2,74 + 1 = 3,74 \rightarrow 4\text{mm}$$

11.1.8.7. Aislamiento

En el caso de los silos, como estos almacenan sólidos no muy sensibles a las variaciones de temperatura, se obviará la posibilidad de proveer el tanque con un aislante.

11.1.8.8. Peso total del tanque

De igual manera que en el caso de los tanques, el peso total del silo, será el peso de este equipo de almacenamiento vacío más el del sólido que deba contener. El primer paso es calcular el peso del silo vacío:



$$P_{vacío} = P_{fondo cónico} + P_{cilindro} + P_{cabezal superior plano} \text{ (Ec. 11.1.81.)}$$

Dónde:

- $P_{fondo cónico}$, es el peso del fondo cónico del silo en kg
- $P_{cilindro}$, es el peso de la parte cilíndrica (sin las tapas) en kg
- $P_{cabezal}$, es el peso del cabezal superior plano en kg

Estos pesos se pueden calcular con las ecuaciones 11.1.82, 11.1.83. y 11.1.84..

$$P_{fondo cónico} = A_{fondo cónico} \cdot t_{cono} \cdot \rho_{AISI316-L} = \pi \cdot \left(\frac{D_{silo}}{2}\right)^2 \cdot \left[\left(\frac{D_{silo}^2}{4} + h_{cono}212 \cdot t_{cono} \cdot \rho_{AISI316-L}\right) \text{ (Ec.11.1.82.)}\right]$$

$$P_{cilindro} = A_{cilindro sin tapas} \cdot t_{cilindro} \cdot \rho_{AISI316-L} = \pi \cdot D \cdot h_{cilindro} \cdot t_{cilindro} \cdot \rho_{AISI316-L} \text{ (Ec. 11.1.83.)}$$

$$P_{cabezal} = V_{cabezal chapa} \cdot \rho_{AISI316-L} = \pi \cdot (r)^2 \cdot t_{cabezal} \cdot \rho_{AISI316-L} \text{ (Ec. 11.1.84.)}$$

Dónde:

- A_{fondo} , es la superficie del fondo en m^2
- t_{fondo} , es el espesor del fondo en m
- $\rho_{AISI316-L}$, es la densidad del acero inoxidable AISI 316-L en kg/m^3



- $V_{cabezal\ chapa}$, es el volumen de chapa del cabezal semiesférico en m^3
- $A_{cilindro\ sin\ tapas}$, es la superficie de la parte cilíndrica (las paredes del silo) en m^2
- $t_{cilindro}$, es el espesor de las paredes cilíndricas en m
- r , es el radio del silo en m
- D , es el diámetro del silo en m

Substituyendo:

$$P_{fondo\ cónico} = \pi \cdot \left(\frac{4,57}{2}\right)^2 \cdot \left[\left(\frac{4,57^2}{4} + 2,29^2\right)\right]^{\frac{1}{2}} \cdot 4 \cdot 10^{-3} \cdot 7980 = 1693,8\ Kg$$

$$P_{cilindro} = \pi \cdot 4,57 \cdot 6,86 \cdot 7 \cdot 10^{-3} \cdot 7980 = 5501,63\ Kg$$

$$P_{cabezal} = \pi \cdot (2,285)^2 \cdot 4 \cdot 10^{-3} \cdot 7980 = 523,58\ Kg$$

De forma que el peso del tanque vacío será:

$$P_{vacío} = 1693,8\ Kg + 5501,63\ Kg + 523,58\ Kg = 7719,01\ Kg$$

Ahora ya se puede calcular el peso del tanque operativo, teniendo en cuenta el volumen que tendrá contenido de amoníaco anhidro y que la densidad de éste en las condiciones del almacenamiento es de $1770\ kg/m^3$.



$$P_{operativo} = 7719,01 \text{ Kg} + 94,096 \text{ m}^3 \cdot 1770 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} = \\ 174268,93 \text{ Kg} \text{ (Ec. 11.1.85.)}$$

11.1.8.9. Especificaciones de los silos

En forma de resumen, se presenta la Tabla 11.1.8.1., donde se pueden observar algunas de las características más importantes de los silos de sulfato de amonio.

Tabla 11.8.1.1.- Características de los silos de sulfato de amonio

ESPECIFICACIONES DE LOS TANQUES DE ALMACENAMIENTO	
PRODUCCIÓN DIARIA (m ³ /día)	117,62
DÍAS STOCK	4
PRESIÓN DISEÑO (atm)	2
VOLUMEN SILO	125
ALTURA TOTAL SILO	9,15
% VOLUMEN OCUPADO	75,28
MATERIAL DE DISEÑO	AISI 316-L
ESPESOR DEL CILINDRO	7
ESPESOR DEL FONDO CÓNICO	4
PESO DEL SILO EN OPERACIÓN	174268,93

11.1.9. ALMACENAMIENTO DEL PRODUCTO: E-CAPROLACTAMA (T-706 A T-T09)

11.1.9.1. Conceptos previos

- Características: Se obtiene caprolactama con elevado porcentaje de pureza; en concreto al 99,72%. Las impurezas obtenidas son de agua, y son prácticamente inapreciables. Por especificaciones de comercialización, la caprolactama debe tener las condiciones de



acabado en estado sólido y en big-bags de 800 kg. Con el fin de llenar estas bolsas, y por si surge algún imprevisto, se decide almacenar la caprolactama también en silos. Es importante remarcar que la caprolactama es considerablemente higroscópica, y que por esta razón, a no ser que esté en big bags cerradas de manera hermética, será recomendable tenerla en atmósferas ausentes de humedad.

- Volumen diario: La caprolactama es el producto principal del proceso, y lógicamente se obtiene en la línea principal de éste; en concreto, a la salida de por colas de las columnas CD-502 y CD-503. La caprolactama sale de dichas columnas en estado líquido, es por eso que se usa una escamadora (ES-501), para solidificar y obtener en forma de escamas la caprolactama. El volumen diario de sólido producido (caprolactama más impurezas) es de:

$$V_{diario} = \left(6350,8 \left(\frac{kg}{h} \right) + 15,5 \left(\frac{kg}{h} \right) \right) \cdot \frac{m^3}{1010,4 \text{ kg}} \cdot \frac{24 \text{ h}}{1 \text{ día}} = \\ 151,22 \frac{m^3}{\text{día}} \quad (\text{Ec. 11. 1. 86.})$$

- Tiempo de “stock”: Para dimensionar los silos de almacenamiento de ε-caprolactama, se ha fijado un tiempo de residencia en la planta (tiempo de “stock”) de 4 días. El transporte del producto principal, igual que el del subproducto, se hará por carretera, con camiones, es por eso que se han tenido en cuenta y tiempo de stock de 4 días, para prevenir posibles huelgas en el transporte y otros contratiempos. Cabe recordar que un aumento del tiempo de “stock” en la planta supondría un aumento del volumen de los silos, lo cual podría causar un problema de espacio en la planta.



Teniendo en cuenta la capacidad de las big-bags (800kg) y el peso diario que se obtiene de caprolactama, se estiman cuantas bolsas serán necesarias cada día:

$$Nº\ big-bags = \frac{Peso_{diario}}{Peso_{big-bag}} = \frac{152791,2}{800} = 190,99$$
$$\rightarrow 191 \frac{big-bags}{día} \text{ (Ec. 11. 1. 87.)}$$

Se procede de la misma manera que en el cálculo del número de silos de sulfato de amonio para determinar el número de camiones necesarios:

$$Nº\ camiones = \frac{Peso_{diario}}{Peso_{camión}} = \frac{152791,2}{23000} = 6,64$$
$$\rightarrow 7 \frac{camiones}{día} \text{ (Ec. 11. 1. 88.)}$$

Es necesario añadir que en un día laboral, los camiones pueden llegar en el período de tiempo que se da entre las 8 horas de la mañana y las 20 horas de la noche; equivaliendo a un total de 12 horas. Teniendo en cuenta esto, a lo largo del día vendrá un camión aproximadamente cada hora y tres cuartos.



11.1.9.2. Número de silos necesarios

Procediendo de la misma manera que en el apartado 11.1.8.2., se determina el número de silos necesarios para almacenar la caprolactama. Los resultados pueden ser apreciados en la Tabla 11.1.9.1.:

Tabla 11.1.9.1.- Resultados en la determinación del número de silos de ε-caprolactama

Volumen stock	604,88 m³
Volumen stock sobredimensionado	695,61 m³
Volumen de silo	200 m³
Número de silos	3,47\cong4
% Volumen ocupado	75,61%

11.1.9.3. Dimensionamiento de los tanques

Se determinan las dimensiones de los silos de caprolactama de la misma manera que se ha hecho en el apartado 11.1.8.3. con los silos de sulfato de amonio. Los resultados se pueden observar en la Tabla 11.1.9.2.



Tabla 11.1.9.2.- Resultados en el dimensionamiento de los silos de ε-caprolactama

Diámetro de silo	5,35 m
Altura del cilindro	8,025 m
Altura del cono	1,175 m
Volumen cilindro	180,40 m ³
Volumen cono	8,80
Altura total del silo	9,2

11.1.9.4. Condiciones para el diseño mecánico de los tanques

Se almacenará la caprolactama a temperatura y presión ambientales. De esta manera, se calcula la temperatura de diseño y también la presión de diseño.

$$T_{diseño} = T_{operación} + 20^{\circ}\text{C} = 20^{\circ}\text{C} + 20^{\circ}\text{C} = 40^{\circ}\text{C} \quad (\text{Ec. 11.1.1.})$$

$$P_d = P_{o\ absoluta} + 1\ atm = 2atm \quad (\text{Ec. 11.1.3.})$$

11.1.9.5. Material de los tanques

Igual que en los casos anteriores, también se ha consultado la guía de la empresa *“Harrington Industrial Plastics”*. En este caso, la caprolactama no está catalogada; independientemente, se decide usar Acero Inoxidable AISI 304-L.



11.1.9.6. Espesor de los tanques

Los resultados se pueden ver en la Tabla 11.1.9.33; éstos han sido obtenidos de la misma manera que en el apartado 11.1.8.6.

Tabla 11.1.9.3.- Espesor de los silos de ϵ -caprolactama

Límite elástico	1068,32 atm
Altura de sólido	6,73 m
ΔP	0,6577 atm
Presión para el espesor	2,6577
Espesor del cilindro	10,34 → 11 mm
Espesor del cono	5,45 → 6 mm

11.1.9.7. Aislamiento

En el caso de los silos, como estos almacenan a temperatura ambiente, no es necesario el uso de aislante.

11.1.9.8. Peso total del tanque

Se determinan los pesos, nuevamente, aplicando las ecuaciones detalladas en el apartado 11.1.8.8, pudiéndose observar los resultados obtenidos en la Tabla 11.1.9.4.:



Tabla 11.1.9.4.- Peso de los silos de ϵ -caprolactama

Peso fondo cónico	3126,10 kg
Peso del cilindro	11913,98 kg
Peso del cabezal plano	8664,71 kg
Peso del silo vacío	23704,79 kg
Peso del silo operativo	176497,48 kg

11.1.9.9. Especificaciones de los tanques

En forma de resumen, se presenta la Tabla 11.1.9.5., donde se pueden observar algunas de las características más importantes de los silos de sulfato de amonio.

Tabla 11.1.9.5.- Características de los silos de ϵ -caprolactama

ESPECIFICACIONES DE LOS TANQUES DE ALMACENAMIENTO	
PRODUCCIÓN DIARIA (m ³ /día)	151,22
DÍAS STOCK	4
PRESIÓN DISEÑO (atm)	2
VOLUMEN SILO	200
ALTURA TOTAL SILO	9,2
% VOLUMEN OCUPADO	75,61
MATERIAL DE DISEÑO	AISI 304-L
ESPESOR DEL CILINDRO	11
ESPESOR DEL FONDO CÓNICO	6
PESO DEL SILO EN OPERACIÓN	176497,48



11.2 REACTORES

11.2.1. REACTOR DE AMOXIMACIÓN: R-201

A continuación se detallan los cálculos llevados a cabo para el diseño del reactor de Amoximación presente en el área 200.

La reacción de amoximación tiene como objetivo la producción de ciclohexanona oxima, la cual es el futuro reactivo que se utilizará para la síntesis de caprolactama. La reacción se lleva a cabo en fase gas y en fase líquida con un catalizador sólido de silicalita de titanio (TS-1).

Los reactivos implicados en este proceso son el peróxido de hidrógeno, la ciclohexanona, el amoníaco, el tert-butanol (como disolvente) y agua.

La reacción llevada a cabo tiene un carácter exotérmico, de manera que el calor producido debe ser eliminado a fin de mantener la temperatura y la conversión de operación constante. El intercambio de calor se realiza mediante una chaqueta de media caña.

Este reactor contiene en su interior pequeñas partículas de catalizador con un diámetro relativamente bajo (400-500 μm). Aunque el tamaño que presentan es bajo, es posible llegar a retener estas partículas en el reactor mediante un tamiz. La retención de éstas es realmente importante, ya que su tiempo de vida promedio es de 1 año. Así pues, hasta el cabo de un año de operación, no es necesario realizar la renovación del catalizador.

El reactor contendrá un tamiz del mismo diámetro que el interno del reactor. Éste será capaz de retener partículas de hasta las 500 μm .

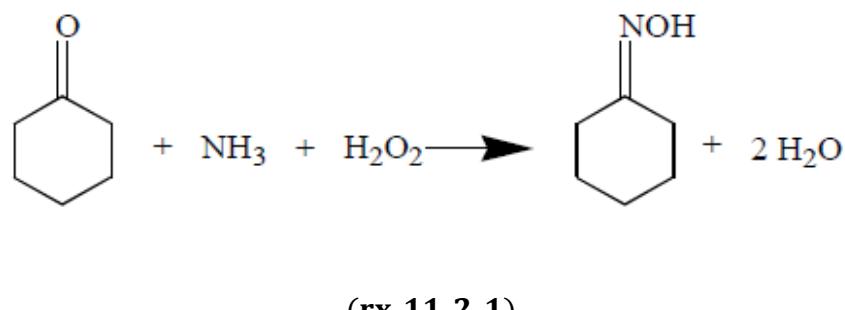
Por otro lado el reactor de amoximación incorpora una salida de gases en la parte superior. Esto es debido a que la reacción de descomposición del peróxido de hidrógeno provoca la formación de oxígeno. Con el fin de expulsar el O₂ y las trazas volátiles de reactivos secundarios se realiza un “*blanketing*” con nitrógeno;



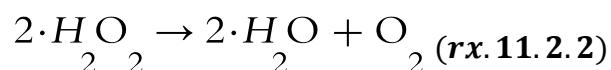
consiguiendo de esta manera impedir la acumulación de gases y evitar los posibles efectos nocivos que se provocaría sobre el sistema.

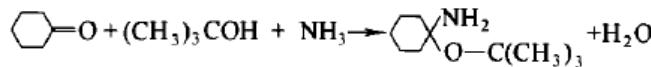
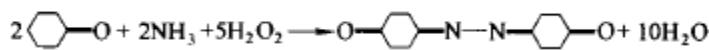
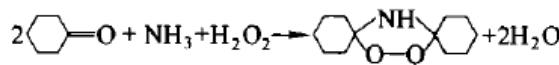
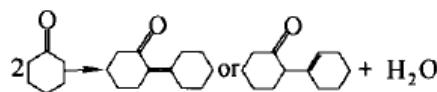
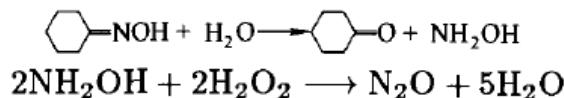
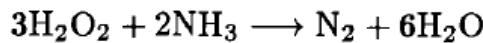
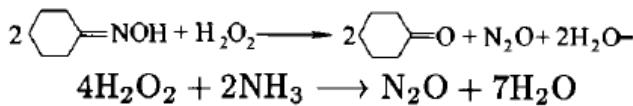
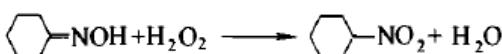
11.2.1.1 Reacciones químicas implicadas

Para llevar a cabo la reacción de amoximación es necesario que el reactor opere a una temperatura de 85ºC y a una presión de 3 bares. A continuación se muestra la reacción que tiene lugar.



Del mismo modo se llevan a cabo una serie de reacciones secundarias las cuales se detallan a continuación:





(rx. 11. 2. 3)

Cabe destacar, que el peróxido de hidrógeno introducido en el reactor entra en un exceso molar del 10% respecto a la ciclohexanona entrante, de modo que esta fracción no reaccionante quedará en el medio dando lugar a la serie de reacciones indicadas anteriormente.

Entre el conjunto de reacciones secundarias destaca con diferencia la descomposición del peróxido de hidrógeno. El conjunto de reacciones restantes no tienen una gran relevancia en el proceso ya que se dan en una proporción menospreciable debido a las condiciones de operación.

En estas reacciones se utiliza un catalizador compuesto de silicato de titanio T1. Los cristales de silicalita de titanio presentan un diámetro de partícula muy



pequeño, este hecho dificulta gravemente los procesos industriales a causa de la difícil separación entre el catalizador y el medio que lo envuelve. Así pues, en este proceso se hará uso de granulados de silicalita 1 de titanio, preparados mediante secado por pulverización en un granulador de lecho fluidizado.

Estos gránulos presentan un diámetro entre 5 y 500 μm , de este modo se logra mejorar la separación entre fases mediante una malla capaz de retener este diámetro de partícula. Se conseguirá también mantener el catalizador en el reactor durante 1 año, ya que este es su tiempo de vida útil.

Las ecuaciones de las velocidades de reacción que se alcanzan mediante este catalizador se muestran a continuación:

- Reacción de Amoximación:

$$r_A = K_{A0} \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) \cdot C_A^\alpha \cdot C_B^\beta \cdot C_C^\gamma \quad (\text{Ecuación 11.2.1.1})$$

Donde las concentraciones de A, B y C corresponden a los compuestos ciclohexanona, peróxido de hidrógeno y amoníaco respectivamente. Por otro lado, las constantes que presenta la ecuación adquieren los valores siguientes:

$$k_{A0} = 4.351 \times 10^{12}$$

$$E_A = 9.551 \times 10^4 \frac{J}{mol}$$

$$\alpha = 0.76$$

$$\beta = 0.19$$

$$\gamma = 0.45$$

$$R = \text{Constante de los gases } 8.31 \frac{J}{mol \cdot k}$$

$$T = \text{Temperatura de operación}$$



- Reacción de descomposición del Peróxido de hidrógeno:

Del mismo modo que en el caso anterior se presenta a continuación la velocidad de descomposición del peróxido de hidrógeno en presencia de la silicalita de titanio (TS-1).

$$r_B = K_{B0} \exp\left(\frac{-E_B}{RT}\right) \cdot C_B^\nu \quad (\text{Ecuación 11.2.1.2})$$

Donde la concentración B pertenece a la concentración del H_2O_2 , y las demás constantes presentan los siguientes valores:

$$k_{B0} = 2.286 \times 10^{10}$$

$$E_A = 8.212 \times 10^4 \frac{J}{mol}$$

$$\nu = 1.55$$

11.2.1.2. Balance de materia

Para el diseño del reactor se han empleado datos experimentales extraídos de diferentes patentes en las que se lleva a cabo la producción de ciclohexanona oxima.

El conjunto de datos extraídos se muestran a continuación.

Tabla 11.2.1.1.- Valores experimentales extraídos de patentes para el diseño del reactor.

τ (h)	1.2
T (°C)	85
P (MPa)	0.3



Juntamente con estos parámetros se indican las proporciones de entrada de los diferentes compuestos respecto la entrada de un mol de ciclohexanona.

Tabla 11. 2.1 .1.- Proporción molar de entrada en el reactor respecto 1 mol de ciclohexanona.

Ciclohexanona	1
H ₂ O ₂	1.1
(La pureza es del 50%)	
NH ₃	1.8
H ₂ O	4.29
Tert-butanol	4

De este modo, y teniendo en cuenta que la producción prevista anual de Caprolactama es de 45.000 Toneladas y que la industria estará operativa 300 días al año las 24 horas del día, se prevé una producción de 6250 kg/h de Caprolactama.

De esta manera se puede estimar la cantidad de ciclohexanona necesaria para llegar a la producción fijada, ya que se conocen las diferentes reacciones y relaciones estequiométricas; de modo que se obtiene un valor de 5412.69 Kg/h de ciclohexanona. Pero, si el cálculo es realizado de este modo no se tienen en cuenta las pérdidas de materia durante las etapas de purificación. Así pues, una vez se han considerado este conjunto de perdidas, el valor necesario obtenido es de 5672.24 Kg/h de ciclohexanona.

El conjunto de caudales de entrada necesarios para llegar a producir la ciclohexanona oxima prevista se muestran a continuación.

Tabla 11. 2. 2.- Composición de los componentes de entrada al reactor

COMPUESTO	Kmol/h	PM(kg/kmol)	Kg/h	ρ(kg/m ³)
Ciclohexanona	57,80	98,14	5672,24	884



H2O2	63,58	34	2161,62	1373
H2O	368,04	18	6624,74	961,32
NH3	104,04	17	1768,60	14,3
Tert-butanol	231,19	74,1	17131,16	709,64

Obteniendo así un caudal másico total de 33358,37 Kg/h y un caudal volumétrico de $39,02 \frac{m^3}{h}$. Una vez se dan las diferentes reacciones en el reactor se obtienen los caudales siguientes:

Tabla 11.2.1.3.- Composición de salida del reactor de Amoximación

COMPUESTO	Kmol/h	PM(kg/kmol)	Kg/h
Ciclohexanona	1.20854458	98.14	118.606565
NH3	47.4465008	17	806.590513
H2O	488.207378	18	8787.7328
Tert-butanol	231.189781	74.1	17131.1628
Oxima	56.5889007	113.16	6403.6
O2	3.49414455	32	111.812626

En este punto del proceso se considera que todo el amoniaco entrante en fase gas se disuelve en el medio líquido. De este modo se obtiene un caudal volumétrico respecto el líquido de $40,87 \frac{m^3}{h}$.

Teniendo noción del tiempo de residencia necesario para llegar a una conversión del 98,5%, se determina el volumen que debe presentar el reactor para la fase líquida.

$$V = \tau \cdot Q_v = 1.2 \cdot 40.87 = 49.04 \text{ m}^3$$

La cantidad de catalizador necesaria es un 3% en masa respecto la masa total de la mezcla, siguiendo este dato extraído de diferentes patentes se obtiene una masa de 1000,78 Kg, y teniendo en cuenta que la concentración de este en el reactor es de



350 $\frac{Kg}{m^3}$, esto provoca un aumento volumétrico en el reactor de $2,86 m^3$. De manera que el volumen resultante en el líquido es $51,9 m^3$.

11.2.1.3. Diseño mecánico del reactor

Una vez se ha obtenido el volumen del fluido, se puede iniciar el diseño mecánico del reactor, para ello se utilizan una serie de correlaciones y rangos de valores ya tabulados.

Se considera que la fracción ocupada por el gas es el 20% del volumen ocupado por el líquido, de modo que $\varepsilon_L = 0.8$ y $\varepsilon_G = 0.2$.

De esta manera queda un volumen total de $57.7 m^3 \approx 58 m^3$, una vez obtenido este resultado se escoge una relación entre altura y diámetro de 1.5, y mediante la ecuación 11.2.1.5, se consigue hallar el diámetro del tanque.

$$\frac{H}{D} = 1.5 \quad (\text{ec. 11.2.1.4.})$$

$$D = \left(\frac{V_{\text{Tanque}} \cdot 4}{1.5 \cdot \pi} \right)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{65 \cdot 4}{1.5 \cdot \pi} \right)^{\frac{1}{3}} = 3.8 m \quad (\text{ec. 11.2.1.5.})$$

De este modo, una vez hallado el diámetro, se consigue determinar la altura aplicando la relación mostrada en la ecuación 11.2.1.4. Así pues, se obtiene una altura de 5.7 m.

Con estos datos ya se puede calcular el área cilíndrica del reactor.



$$A_{circular} = \pi \cdot D \cdot H = 68.3 \text{ m}^2 \quad (\text{ec. 11.2.1.6.})$$

Una vez se tiene dimensionada la parte cilíndrica se diseñan las tapas del reactor. Teniendo en cuenta que se opera a 3 bares de presión y que el tanque se encuentra agitado mediante una turbina, se ha optado por escoger un cabezal y un fondo toriesférico, de esta manera el recipiente presenta una mayor tolerancia a la presión. Además en cuanto a la agitación y homogeneidad gracias a la forma toriesférica del fondo, se evitan las zonas muertas.

Para llevara a cabo el cálculo volumétrico de estas tapas se ha hecho uso de las tablas facilitadas por la normativa **ASME**, en las que se muestran las relaciones que deben mantenerse para el diseño de estas.

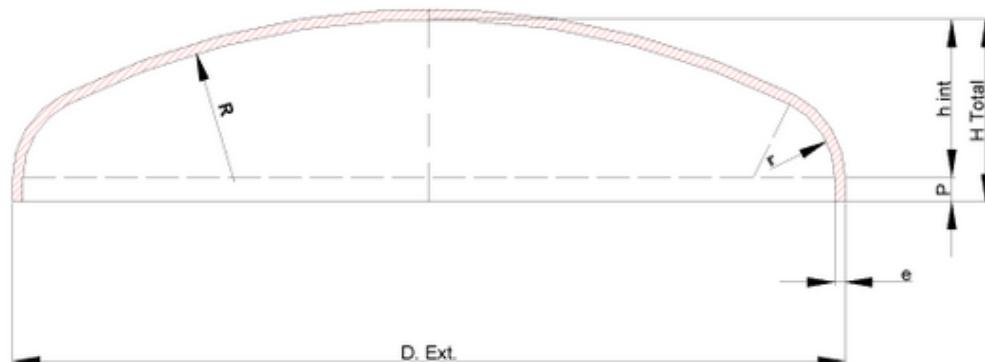


Figura 11.1.2.1.- Relación mantenida para el diseño de las tapas toriesféricas.

La radios R y r corresponden al Diámetro del tanque y al 10% del diámetro del tanque respectivamente. De modo que los resultados obtenidos para los radios del toriesférico son R=3.8 m y r=0.38 m.

Para el cálculo de alturas y volúmenes que presentan el cabezal y el fondo se han seguido las correlaciones que se muestran en la figura 11.2.1.2.



Tabla 11.2.14.- Correlaciones utilizadas para el diseño del cabezal toriesférico.

Parámetro	Toriesférico ASME
Volumen	$0.08088 \cdot D^3$
Área	$0.931 \cdot D_0^2$
Altura	$0.169 \cdot D$

A continuación se muestran los datos obtenidos mediante las correlaciones anteriores.

Tabla 11.2.16.- Resultados obtenidos aplicando las correlaciones de la tabla 11.2.5

h toriesférico (m)	0.65
Vcabezal toriesférico (m^3)	4.47

Para determinar el volumen total y posteriormente la altura del líquido se debe efectuar el sumatorio de los volúmenes del cilindro y los cabezales tal y como se muestra en la ecuación 11.2.1.7.

$$V_{Total} = V_{cilíndro} + V_{Cabezal} + V_{Fondo} \text{ (ec. 11.2.1.7.)}$$

El volumen total resultante es $73.92 \text{ m}^3 \approx 74 \text{ m}^3$.

Para el cálculo de la altura del líquido se realiza el diferencial de volumen entre el volumen del líquido que había inicialmente en el cilindro y el volumen de líquido que va a parar al cabezal toriesférico. Pero se debe tener en cuenta que posteriormente se introducirá un serpentín para eliminar el calor formado por la reacción; este serpentín ocupa un volumen de 1.97 m^3 . Así pues, se añade este volumen al volumen que ocupa



el líquido en la parte cilíndrica del reactor, incrementándose el volumen hasta $53.97m^3$.

El volumen restante que queda en el cilindro una vez añadido el fondo torisférico es de $49.5 m^3$. Finalmente, aplicando la ecuación 11.2.1.8, se obtiene una altura en el cilindro de $4.35 m^3$.

$$H_{líquido\ cilíndro} = \frac{V_{final\ cilíndro}}{A_{Paso\ cilíndro}} \quad (\text{ec. 11.2.1.8.})$$

Una vez conseguida la altura de líquido en el cilindro, se le añade la altura del fondo torisférico que se encuentra en la anterior tabla 11.2.6. De este modo se consigue la altura total del líquido en el reactor aplicando la ecuación 11.2.1.9. Quedando finalmente un valor de $5 m^3$.

$$H_{Total\ líquido} = H_{líquido\ cilíndro} + H_{torisférico} \quad (\text{ec. 11.2.1.9.})$$

Teniendo en cuenta los valores añadidos del cabezal y el fondo torisférico, la relación altura diámetro se ve incrementada alcanzando un valor de **1.8**.

De este modo se realiza un sobredimensionamiento del **14%** respecto el volumen inicial calculado.

11.2.1.4. Calculo del espesor del tanque

- Parte cilíndrica:



Para determinar el espesor que debe presentar la pared cilíndrica en las condiciones de operación, se debe conocer la presión que ejerce el fluido en el reactor. Para ello se utiliza la ecuación 11.2.1.10.

$$\Delta P_I = \rho_m \cdot g \cdot H_I \text{ (ec. 11.2.1.10.)}$$

El resultado obtenido se muestra a continuación:

$$794.25 \frac{kg}{m^3} \cdot 9.81 \frac{m}{s^2} \cdot 5 m \cdot \frac{1 \text{ atm}}{1.01325 \cdot 10^5 \text{ pa}} = 0.3839 \text{ atm}$$

Seguidamente se determina la presión de diseño y se sobredimensiona un 15%:

$$P_{\text{diseño}} = \Delta P_{\text{líquido}} + P_{\text{Tanque}} + P_{\text{atm}} \text{ (ec. 11.2.1.11.)}$$

$$0.383 \text{ atm} + 3 \text{ atm} + 1 \text{ atm} = 5.04 \text{ atm}$$

Una vez hallados todos los valores se aplica la ecuación que se muestra a continuación para determinar el espeso necesario.

$$t_{\text{cilíndro}} = \frac{P_d \cdot R}{S \cdot E - 0.6 \cdot P_d} + C_1 + C_2 \text{ (ec. 11.2.1.12.)}$$

Dónde:

- t_{cilindro} → Grosor de la pared cilíndrica (m).
- P_d → Presión de diseño (atm).
- E → Factor de soldadura.



- $R \rightarrow$ Radio del cuerpo cilíndrico.
- $s \rightarrow$ Máxima tensión admisible (atm).

La tensión máxima admisible se extrae de la tabla del acero inoxidable AISI 304-L.

Tabla 11.2.7. Tabla sobre el límite elástico del Acero AISI304-L en función de la temperatura.

Specification		Maximum Allowable Stress, ksi (Multiply by 1000 to Obtain psi), for Metal Temp., °F, Not Exceeding									
Number	Grade	-20 to 100	200	300	400	500	600	650	700	750	800
SA-240	304	18,8	17,8	16,6	16,2	15,9	15,9	15,9	15,9	15,5	15,2
SA-240	304L	15,7	15,7	15,3	14,7	14,4	14	13,7	13,5	13,3	13
SA-240	316	18,8	18,8	18,4	18,1	18,0	17,0	16,7	16,3	16,1	15,9
SA-240	316L	15,7	15,7	15,7	15,5	14,4	13,5	13,2	12,9	12,6	12,4

$$\frac{5.04 \text{ atm} \cdot 1.9 \text{ m}}{1211.2 \text{ atm} \cdot 0.85 - 0.6 \cdot 5.04 \text{ atm}} + 0.001 \text{ m} + 0.0008 \text{ m} =$$

$$0.011177 \text{ m} \approx 13 \text{ mm}$$

Teniendo en cuenta el espesor sobredimensionado de **13mm**, se obtiene finalmente un diámetro exterior de **3.83 m**.

- Cabezal Toriesférico

Del mismo modo que en el caso anterior se aplica la ecuación proporcionada por el código ASME, esta vez, como se trata del cabezal superior, la columna de



presión ejercida por el fluido no debe contemplarse en el cálculo de la presión de diseño.

$$t_{torisférico} = \frac{P_{d,c} \cdot M \cdot D_{Tanque}}{2 \cdot S \cdot E - 0.2 \cdot P_d} \quad (\text{ec. 11.2.1.13.})$$

$$\frac{4.45 \cdot 1.54 \cdot 3.8}{2 \cdot 1211.2 \cdot 0.85 - 0.2 \cdot 4.45} = 0.01419 \text{ m}$$

Tabla 11.2.1.8.- Valores de M para el cálculo del cabezal torisférico.

VALUES OF FACTOR "M"																	
L/r	1.00	1.25	1.50	1.75	2.00	2.25	2.50	2.75	3.00	3.25	3.50	4.00	4.50	5.00	5.50	6.00	6.50
M	1.00	1.03	1.06	1.08	1.10	1.13	1.15	1.17	1.18	1.20	1.22	1.25	1.28	1.31	1.34	1.36	1.39
L/r	7.00	7.50	8.00	8.50	9.00	9.50	10.0	10.5	11.0	11.5	12.0	13.0	14.0	15.0	16.0	16.3	*
M	1.41	1.44	1.46	1.48	1.50	1.52	1.54	1.56	1.58	1.60	1.62	1.65	1.69	1.72	1.75	1.77	

* THE MAXIMUM ALLOWED RATIO : $L = D + 21$ (see note 2 on facing page)

Aplicando la anterior ecuación se obtiene un valor de **14.19mm≈14.5mm** de espesor en el cabezal.

- Fondo Torisférico:



Para calcular el grosor del fondo se aplica la misma ecuación que en el caso anterior pero utilizando la presión de diseño que tiene en cuenta la columna de líquido.

Así pues, efectuando este cálculo se llega a obtener un grosor de **14,5mm** para el fondo toriesférico.

11.2.1.5. Peso del Reactor

El peso del reactor se calcula a partir del grosor y la superficie que ocupa cada componente que conforma el recipiente del reactor.

- Peso del fondo toriesférico:

Para realizar el cálculo del peso del fondo primeramente se debe calcular el volumen que ocupa el grosor del fondo toriesférico, para ello se aplica la siguiente fórmula:

$$V_{Fondo} = 0.08089 \cdot (D_{Tanque} + t_{Fondo})^3 - 0.08089 \cdot (D_{Tanque})^3$$

(ec. 11.2.1.14.)

Se obtiene finalmente un volumen de **0.050 m³**, de modo que conociendo la densidad del Acero AISI-304L, **8030 $\frac{Kg}{m^3}$** , se obtiene un peso de **408.35Kg**.

- Peso del cabezal toriesférico:



El cálculo llevado a cabo para conseguir el peso del cabezal tóriesférico consiste en el mismo procedimiento anteriormente expuesto para el cálculo del fondo, esto es así debido a que las dos partes comparten la misma simetría.

$$V_{Cabeza} = 0.08089 \cdot (D_{Tanque} + t_{Cabeza})^3 - 0.08089 \cdot (D_{Tanque})^3$$

(ec. 11.2.1.15.)

Para el cabezal se obtiene un volumen de **0.045 m³** y consiguientemente un peso de **359.1 Kg**.

- Peso del cuerpo cilíndrico del reactor:

El cálculo del peso de la parte cilíndrica del reactor difiere ligeramente del cálculo de las anteriores partes del reactor ya que la geometría de este es diferente.

A continuación se muestra la ecuación utilizada para determinar el peso:

$$P_{cil} = \pi \cdot D \cdot H_{cil} \cdot t_{cil} \cdot \rho_{Acero} = \pi \cdot 3.80 \text{ m} \cdot 5.71 \text{ m} \cdot 0.013 \text{ m} \cdot 8030 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

7129,5 Kg

- Peso del reactor vacío

Una vez se han hallado los pesos de las diferentes partes del reactor se procede a determinar el peso del equipo vacío, para ello eso se hace uso de la ecuación siguiente:

$$P_{Reactor} = P_{Cabeza} + P_{Fondo} + P_{Cilindro} \quad (\text{ec. 11.2.1.16.})$$



El sumatorio de los diferentes pesos proporciona el peso total del reactor cuando se encuentra vacío, el valor alcanzado es de **7858.43 Kg**, esto equivale a **7.85 toneladas**.

Una vez conseguido el peso vacío, se estima el peso presentado por el reactor cuando se encuentra en operación, para ello se utiliza la densidad de la mezcla y el volumen ocupado por ella.

$$P_{Mezcla} = \rho_{Mezcla} \cdot V_{mezcla} \text{ (ec. 11.2.1.17.)}$$

$$794.25 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} \cdot 52 \text{ m}^3 = 41301 \text{ Kg}$$

Efectuando el sumatorio entre el peso del reactor vacío y la mezcla que contiene, se estima el peso del reactor en operación, otorgando así un valor de **41301.029 Kg**, en otras unidades, **49.19 Tn**.

11.2.1.6. Diseño mecánico del agitador

En el reactor de amoximación se da la primera reacción del proceso, donde la ciclohexanona junto con otros reactivos pasa a ser ciclohexanona oxima. Para que la reacción alcance la conversión fijada es necesario que la mezcla reactante sea completamente homogénea, para ello se debe mantener un régimen turbulento en el reactor. Para lograr este objetivo se introduce en el reactor un **agitador de turbina de 6 palas**.

El diseño del agitador se realiza en base al diámetro del tanque tal y como se muestra en la siguiente figura:

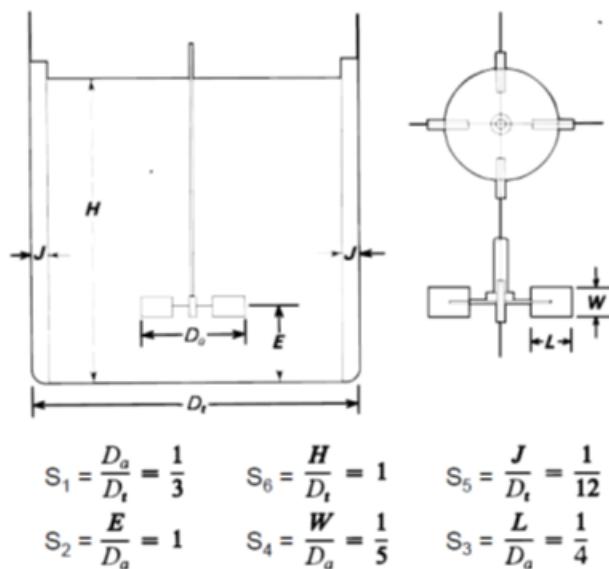


Figura 11.1.2 2.- Relaciones para el diseño del agitador.

Los resultados obtenidos de la aplicación de este conjunto de relaciones se presentan en la tabla siguiente:

Tabla 11.2.1.9.- Valores obtenidos para el dimensionamiento del agitador.

Indicación Gráfica	Relación	Valor (m)
S1(0.33)	$D_a/D_t=1/3$	1.27
S2(1)	$E/D_a=1$	1.27
S3 (0.25)	$L/D_a=1/4$	0.32
S4 (0.20)	$W/D_a=1/5$	0.25
S5(0.083)	$J/D_t=1/12$	0.32
S6(1)	$H/D_t=1$	3.81

Una vez especificadas las dimensiones de las diferentes partes que constituyen el agitador, se realiza el cálculo de potencia necesaria para poder homogenizar la mezcla.



Para ello inicialmente es necesario calcular el número de Reynolds.

$$Re = \frac{\rho \cdot n \cdot D_a^2}{\mu} = \frac{794.3 \frac{Kg}{m^3} \cdot 2 \frac{rev}{s} \cdot (1.27 m)^2}{0.000645 \frac{Kg}{m \cdot s}} = 2.97 \cdot 10^6 \quad (\text{ec. 11. 2. 1. 18.})$$

Dónde:

- ρ → Densidad de la mezcla ($\frac{Kg}{m^3}$).
- n → Número de revoluciones por segundo del agitador (rps)
- D_a → Diámetro de la pala (m)
- μ → Viscosidad de la mezcla ($\frac{Kg}{m \cdot s}$).

Se puede apreciar que el Reynolds obtenido es superior a 10^5 hecho que indica que el régimen de circulación es turbulento y por consiguiente la mezcla está bien homogeneizada. Para hallar el número de potencia se utiliza la siguiente gráfica, donde se encuentra el número de potencia relacionado con el número de Reynolds.

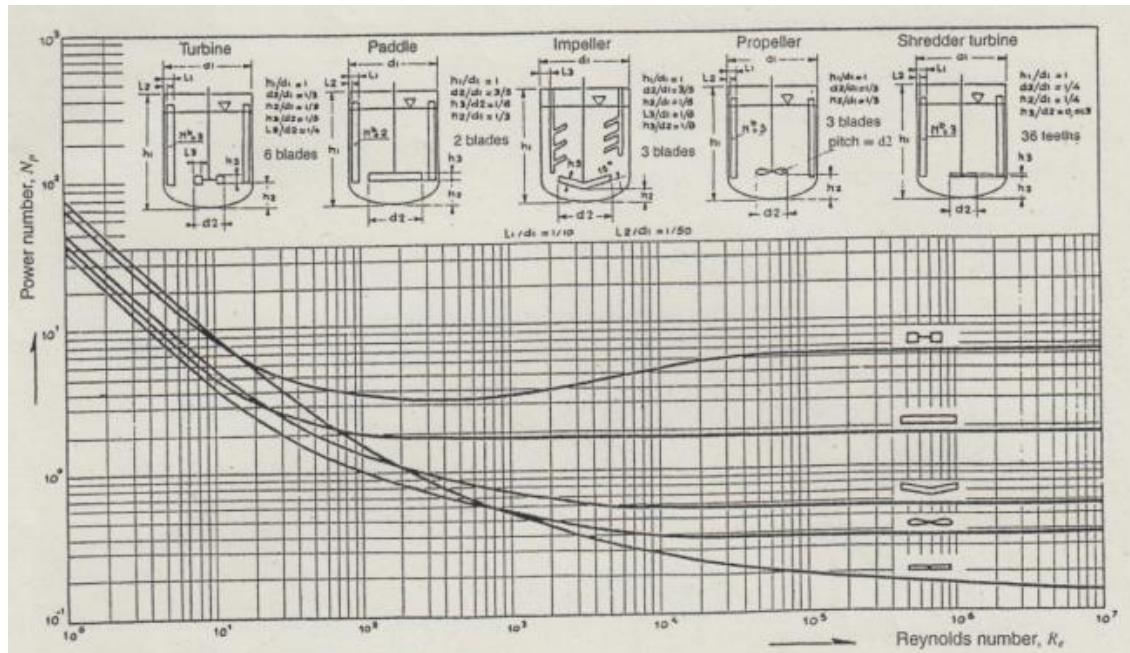


Figura 11.2.1.1.- Curvas para el cálculo de potencia en función del Reynolds y del tipo de agitador.

Se observa que a un Reynolds superior de 10^5 , la turbina de palas adquiere un número de potencia de 5.

$$P = \frac{D_a^5 \cdot N_p \cdot n^3 \cdot \rho_{Mezcla}}{g} = \frac{(1.27 m)^5 \cdot 5 \cdot \left(2 \frac{rev}{s} \right)^3 \cdot 794.3 \frac{Kg}{m^3}}{9.81 \frac{m}{s^2}}$$

$$= 4495.87 W \approx 4.5 KW \text{ (ec. 11.2.1.19.)}$$

Para determinar si el valor es coherente se calcula la potencia entre el volumen y se compara con los valores estándares de la tabla que se muestra a continuación.



$$\frac{P}{V_I} = \frac{4.5 \text{ KW}}{52 \text{ m}^3} = 0.0864 \text{ (ec. 11.2.1.20.)}$$

Agitation	Applications	Power, kW/m ³
Mild	Blending, mixing	0.04–0.10
	Homogeneous reactions	0.01–0.03
Medium	Heat transfer	0.03–1.0
	Liquid-liquid mixing	1.0–1.5
Severe	Slurry suspension	1.5–2.0
	Gas absorption,	1.5–2.0
	Emulsions	1.5–2.0
Violent	Fine slurry suspension	> 2.0

Figura 11. 2. 1.2.- Estándares de las relaciones de potencia/volumen para las diferentes mezclas

El coeficiente de mezcla puede situarse entre el rango de mezcla leve mezcla homogénea, este hecho corrobora la validación del diseño del agitador.

11.2.1.7. Determinación del difusor para la entrada del Amoníaco y de Nitrógeno

El reactor R-201 incorpora un difusor en el fondo del reactor bajo la malla de filtro. El difusor tiene la función conducir el reactivo $NH_3(g)$ juntamente con el nitrógeno que permite el “blanketing”.

La introducción de un difusor en el sistema garantiza una buena distribución homogénea del gas sobre los reactivos, de este modo se ha escogido un difusor modelo 196 de la casa Saint-Gobain NorPro, los detalles de este tipo de difusor se muestran en la siguiente Figura.

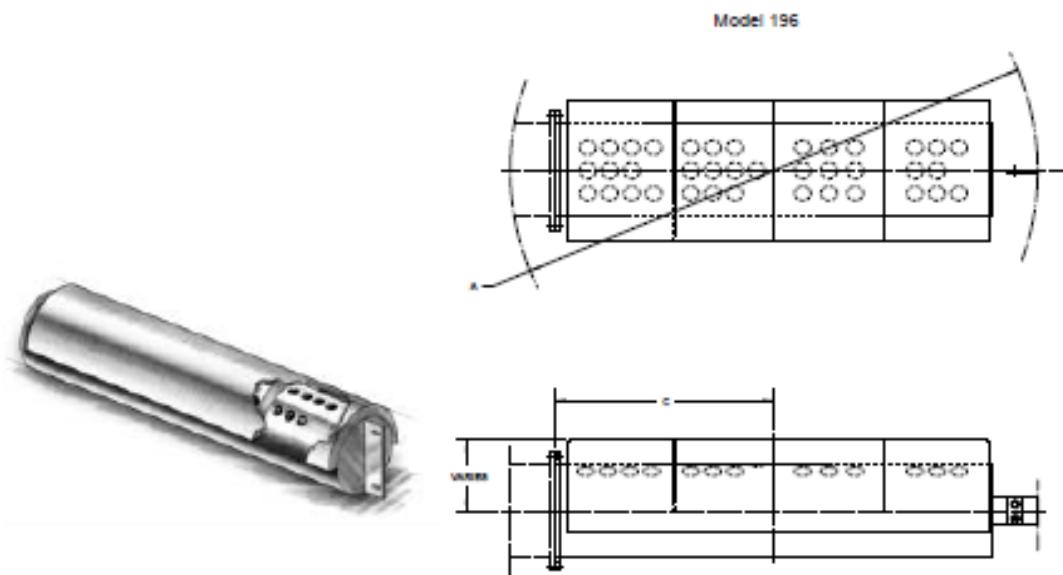


Figura 11. 2.1. 5.- Difusor de la casa Saint-Gobain NorPro

11.2.1.8. Aislamiento

A causa de la temperatura del reactor de amoximación es preciso aislarlo térmicamente de manera que la superficie del equipo no se encuentre a la temperatura de 82 °C. Para decidir qué tipo de material aislante debe recubrir el equipo y que espesor debe presentar, se ha hecho uso del programa INSULAN de la compañía COLORCOL, el cual facilita el cálculo de los parámetros de interés.

Una vez iniciado el programa se completan los recuadros de información y el programa procede a la estimación los parámetros. Estos parámetros son el espesor, la temperatura de la superficie final y la eficiencia del aislamiento.

Tabla 11. 2.1.50.- Valores obtenidos con el soporte informático Calorcol

Temperatura en la superficie del Aislante (°C)	39,69
Espesor del Aislante (cm)	1,6
Eficiencia del aislamiento	87,84



A continuación se muestra la interfaz que presenta el programa para la introducción de datos:



Figura 11. 2.1. 6.- Datos necesarios para el funcionamiento del programa

CALORCOL

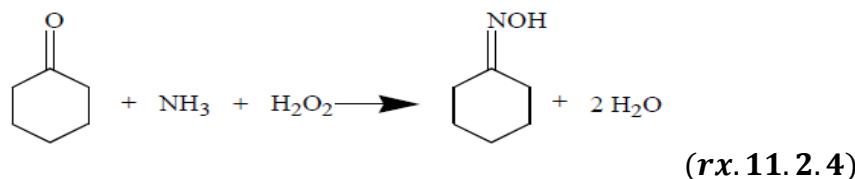
11.2.1.9. Diseño de los sistemas de intercambio de calor del reactor

- Entalpia de reacción de amoximación:

La reacción de amoximación de la ciclohexanona presenta un cierto carácter exotérmico, de modo que se debe eliminar el calor generado por la reacción a fin de mantener el reactor en condiciones isotermas.



Para determinar el sistema a seguir para la eliminación de calor, primeramente es necesario cuantificar el calor generado por la reacción, es decir la entalpia de reacción que muestra. Para ello se deben poseer las entalpias de formación de todos los compuestos que intervienen en la reacción.



De este modo se presentan en la tabla siguiente las entalpias de reacción de todos los compuestos que intervienen:

Tabla 11.2.1.11.- Entalpias de los diferentes compuestos que forman parte de la reacción de amoximación

COMPUESTO	$\Delta H_f a 25^\circ\text{C} \left(\frac{\text{KJ}}{\text{Kmol}} \right)$
Ciclohexanona	-278282.45
H ₂ O ₂	-189575.65
NH ₃	-45629.47
H ₂ O	-284660.79
Oxima	-254956.19

El cálculo de la entalpia de reacción se lleva a cabo siguiendo la ecuación que se muestra a continuación:

$$\Delta H_r = \sum v_i \cdot \Delta H_f \text{ (ec. 11.2.1.21.)}$$



De este modo, se obtiene una entalpia de reacción de $\Delta H_r^o = -3.1 \cdot 10^5$. Remarcar que esta entalpia está referida a condiciones estándar. Para encontrar la entalpia a 85°C, que es la temperatura de operación del reactor, se hace uso de la siguiente ecuación:

$$\Delta H_{T2} = \Delta H_{T1} + \int \Delta C_P \cdot \Delta T \quad (\text{ec. 11. 2. 1. 22.})$$

Donde se contemplan las entalpias de reacción a diferentes temperaturas con el incremento de la capacidad calorífica.

Tabla 11. 2.1.62.- Capacidades caloríficas de los diferentes compuestos que intervienen en la reacción

COMPUESTO	v_i	$C_p \left(\frac{KJ}{Kmol \cdot ^oC} \right)$
Ciclohexanona	-1	174.40
H ₂ O ₂	-1	99.77
NH ₃	-1	35.63
H ₂ O	2	75.63
Oxima	1	206.38

Dónde

$$\Delta C_P = \sum v_i \cdot C_P = 47.829 \frac{KJ}{Kmol \cdot ^oC}$$

Finalmente se consigue un valor para la entalpia de reacción a 82°C de

$$\Delta H_{r82^oC} = -3.08 \cdot 10^5$$

Para poder acabar de determinar el calor producido por la reacción, a banda del calor de reacción es necesario el caudal másico del reactivo limitante y la



conversión a la que se llega, juntamente con la temperatura y caudales del alimento, como se muestra en la siguiente ecuación:

$$\sum m_e \cdot C_P \cdot (T - T_e) - \frac{m_{ke}}{v_k} \cdot X_k \cdot \Delta H_r = Q \quad (\text{ec. 11.2.1.23.})$$

El calor absorbido por la mezcla, se refleja en la primera parte de la ecuación, de modo que si la temperatura de entrada del fluido es de 80°C y la de salida es de 82°C, el calor absorbido se puede cuantificar del siguiente modo:

$$\sum m_e \cdot C_P \cdot (T - T_e) = \quad (\text{ec. 11.2.1.24.})$$

Tabla 11.2.1.73.- Datos para determinar el calor absorbido por la mezcla

Compuesto	Kmols/h	Cp (KJ/Kmol·°C)	PM	m·Cp
Ciclohexanona	57.7974453	198.92978	98.14	11497.63307
H2O2	63.5771898	100.028	34	6359.499139
H2O	368.041287	75.42	18	27757.6739
NH3	47,4465	37.145	17	1762,003
Tert-butanol	231.189781	229.71	74.1	53106.6046

Una parte del NH3 entra directamente desde los tanques de almacenamiento, de este modo los 56,58 Kmol/h absorberán una mayor fracción de calor que el NH3 que se recircula y se encuentra a mayor temperatura.

De este modo, aplicando la ecuación anteriormente descrita se deduce que la mezcla podrá absorber la siguiente cantidad de calor:

$$Q_{\text{Absorbido por la mezcla}} = 3,21 \cdot 10^5 \frac{KJ}{h}$$



El calor generado por la reacción es calculado mediante el segundo término de la ecuación.

$$-\frac{m_{ke}}{v_k} \cdot X_k \cdot \text{Selectividad} \cdot \Delta H_r$$

$$\frac{-57.8 \frac{\text{Kmol}}{\text{h}}}{-1} \cdot 0.985 \cdot 0.994 \cdot -3.08 \cdot 10^5 \frac{\text{KJ}}{\text{Kmol}}$$

$$Q_{\text{Generado por la reacción}} = 1.74 \cdot 10^7 \frac{\text{KJ}}{\text{h}}$$

Realizando el sumatorio de ambas calores, se encuentra el calor total a eliminar.

$$Q_{\text{Calor total a eliminar}} = 1.71 \cdot 10^7 \frac{\text{KJ}}{\text{h}}$$

- Diseño de la media caña:

En el caso que el rector operase libremente sin ningún tipo de control de temperatura, este alcanzaría los 248,48 °C, de modo que es necesario diseñar un sistema de intercambio de calor a fin de asegurar unas condiciones isotermas y óptimas para que se lleve a cabo la reacción.

Una vez se conoce el calor que genera la reacción por unidad de tiempo, se diseña una camisa de media caña con la finalidad de disipar una relación de 2/5 del calor total. De este modo queda un total de $-6.8 \cdot 10^6 \frac{\text{KJ}}{\text{h}}$ a disipar por la media caña.

Para disipar el calor mediante la doble caña se hace pasar un flujo de agua desde la torre de refrigeración, de modo que esta entra a 15°C y sale a 30°C. Así pues, para determinar el caudal de refrigerante se aplica la siguiente ecuación:



$$Q = C_{pref} \cdot m_{ref} \cdot (T - T_0) \quad (\text{ec. 11.2.1.25.})$$

$$-6841638 = 4.18 \frac{KJ}{Kg \cdot {}^oC} \cdot m_{ref} \cdot (30 - 15)$$

$$m_{ref} = 109117 \frac{Kg}{h}$$

Una vez hallado el caudal mísico de refrigeración necesario para disipar todo el calor, se selecciona una velocidad de paso por el interior de la caña. El rango óptimo se encuentra entre 1.5 y $2.5 \frac{m}{s}$, de este modo se selecciona una velocidad de $2.5 \frac{m}{s}$.

Para determinar el caudal volumétrico de refrigerante se hace uso de la densidad del agua

$$\rho_{H2O} = 1000 \frac{Kg}{m^3}$$

$$Q_{vref} = \frac{109117 \frac{Kg}{h}}{1000 \frac{Kg}{m^3}} = 109,1 \frac{m^3}{h}$$

De esta manera, teniendo el caudal y la velocidad, se puede hallar el área de paso de la media caña.

$$A_{paso \frac{1}{2} caña} = \frac{Q_{vref}}{v} = \frac{109,1 \frac{m^3}{h}}{2.5 \frac{m}{s} \cdot \frac{3600 s}{1 h}} = 0,0121 m^2$$

$$D_{int} = \frac{\sqrt{A_{paso \cdot 8}}}{\pi} = \sqrt{\frac{0.0121 \cdot 8}{\pi}} = 0.1757 \approx 0.18m \quad (\text{ec. 11.2.1.26.})$$



El espesor de la caña escogido se ha encontrado bibliográficamente y tiene un valor de **0.03 m**. De esta forma, se obtiene finalmente un diámetro exterior de **0.24m**.

Una vez que se ha conseguido determinar el diámetro externo de la media caña, se procede al cálculo del área necesaria de intercambio.

Para este fin se lleva a cabo el método de cálculo siguiente:

$$A = \frac{q}{\Delta TML \cdot U} \quad (\text{ec. 11.2.1.27.})$$

Dónde:

- $A \rightarrow$ Área de transferencia de calor necesaria (m^2).
- $\Delta TML \rightarrow$ Incremento de temperaturas medio logarítmico
- $U \rightarrow$ Coeficiente de transferencia de energía global ($\frac{W}{s \cdot m^2}$).
- $q \rightarrow$ Calor absorbido $\frac{KJ}{h}$

Inicialmente se procede a efectuar el cálculo del incremento de temperaturas medio logarítmico.

$$\Delta TML = \frac{(T_0 - T_{fF}) - (T - T_{0F})}{\ln\left(\frac{(T_0 - T_{fF})}{(T - T_{0F})}\right)} \quad (\text{ec. 11.2.1.28.})$$

$$\frac{(80 - 30) - (82 - 15)}{\ln\left(\frac{(80 - 30)}{(82 - 15)}\right)} = 59$$

Dónde:

- $T_0 \rightarrow$ Temperatura inicial de la mezcla portadora de calor.



- T → Temperatura final de la mezcla calorífica.
- T_{0F} → Temperatura inicial del fluido refrigerante.
- T_{fF} → Temperatura final del fluido refrigerante.

Seguidamente se estima el valor del coeficiente global de transmisión de calor U . Para ello se ha utilizado una tabla de valores predeterminados, encontrada en el (Robert H. Perry, 2008)

El coeficiente estimado ha sido finalmente de $680 \frac{W}{s \cdot m^2}$. Este coeficiente pertenece a una solución orgánica en el interior del reactor y con un corriente de refrigeración por el serpentín compuesto de salmuera, es decir agua con sal común. En nuestro caso será agua descalcificada, pero debido a que los rangos son tan elevados y los compuestos tan parecidos, se toma este valor como correcto.

Jacket fluid	Fluid in vessel	Wall material	Overall U^*	
			Btu/(h · ft ² · °F)	J/(m ² · s · K)
Steam	Water	Stainless steel	150–300	850–1700
Steam	Aqueous solution	Stainless steel	80–200	450–1140
Steam	Organics	Stainless steel	50–150	285–850
Steam	Light oil	Stainless steel	60–160	340–910
Steam	Heavy oil	Stainless steel	10–50	57–285
Brine	Water	Stainless steel	40–180	230–1625
Brine	Aqueous solution	Stainless steel	35–150	200–850
Brine	Organics	Stainless steel	30–120	170–680
Brine	Light oil	Stainless steel	35–130	200–740
Brine	Heavy oil	Stainless steel	10–30	57–170
Heat-transfer oil	Water	Stainless steel	50–200	285–1140
Heat-transfer oil	Aqueous solution	Stainless steel	40–170	230–965
Heat-transfer oil	Organics	Stainless steel	30–120	170–680
Heat-transfer oil	Light oil	Stainless steel	35–130	200–740
Heat-transfer oil	Heavy oil	Stainless steel	10–40	57–230
Steam	Water	Glass-lined CS	70–100	400–570
Steam	Aqueous solution	Glass-lined CS	50–85	285–480
Steam	Organics	Glass-lined CS	30–70	170–400
Steam	Light oil	Glass-lined CS	40–75	230–425
Steam	Heavy oil	Glass-lined CS	10–40	57–230
Brine	Water	Glass-lined CS	30–80	170–450
Brine	Aqueous solution	Glass-lined CS	25–70	140–400
Brine	Organics	Glass-lined CS	20–60	115–340
Brine	Light oil	Glass-lined CS	25–65	140–370
Brine	Heavy oil	Glass-lined CS	10–30	57–170
Heat-transfer oil	Water	Glass-lined CS	30–80	170–450
Heat-transfer oil	Aqueous solution	Glass-lined CS	25–70	140–400
Heat-transfer oil	Organics	Glass-lined CS	25–65	140–370
Heat-transfer oil	Light oil	Glass-lined CS	20–70	115–400
Heat-transfer oil	Heavy oil	Glass-lined CS	10–35	57–200

*Values listed are for moderate nonproximity agitation. CS = carbon steel.

Figura 11.2.1.7.- Coeficientes globales de transmisión de calor para diferentes compuestos en una camisa de refrigeración.



De esta forma, una vez se han logrado obtener todas las variables de la ecuación de transmisión de calor, se sustituyen los valores para encontrar el área de intercambio necesaria.

$$A = \frac{q}{\Delta T M L \cdot U} = \frac{-6841638 \frac{KJ}{h}}{680 \frac{J}{s \cdot m^2} \cdot \frac{3600 s}{h} \cdot \frac{1 KJ}{1000 J} \cdot 60} = 47,37 m^2$$

Obteniendo finalmente una área necesaria de 47,37 m², tal y como se puede observar, el área necesaria a intercambiar es inferior al área que presenta el reactor, siendo posible de este modo llegar a intercambiar el calor necesario.

Para determinar la altura que presenta la media caña es necesario calcular previamente la longitud presenta esta.

Para ello se utiliza la siguiente ecuación:

$$L = \frac{A}{\pi \cdot D_{ext}} = \frac{47,37 m^2}{\pi \cdot 0.24 m} = 62,82 m$$

Donde:

$A \rightarrow$ Área necesaria para efectuar el intercambio de calor total (m²).

$D_{ext} \rightarrow$ Diámetro externo de la media caña (m).

Una vez conseguida la longitud de la media caña, se calcula el número de vueltas que esta realiza alrededor del tanque.

$$L_{1 \text{ vuelta}} = \pi \cdot D_{Tanque} = \pi \cdot 3.8 m = 11.95 m$$



Con estos dos valores se pueden calcular el número de vueltas que se dan alrededor del tanque.

$$n_{vueltas} = \frac{62,82 \text{ m}}{11.95 \text{ m}} = 5.25$$

El numero de vueltas debe de ser entero de modo que finalmente queda un valor de 7 vueltas.

Por último se realiza el cálculo de la altura de la media caña.

$$H_{Caña} = (D_{Caña} + S) \cdot n_{vueltas} = (0.24 \text{ m} + 0.25 \text{ m}) \cdot 6 = 2.94 \text{ m}$$

Dónde:

- $D_{Caña}$ → Diámetro de la media caña (m).
- S → Separación entre cada vuelta de la media caña (m).
- $n_{vueltas}$ → Número de vueltas que realiza la media caña.

Como se puede comprobar, la altura de la media caña es inferior a la altura del líquido calculada anteriormente. De este modo se puede afirmar que la caña estará intercambiando calor con la zona líquida y no con la zona gaseosa.

- Diseño del serpentín:

Tal y como se ha observado anteriormente, la media caña no es capaz de disipar todo el calor generado por la reacción de modo que 2/5 del calor total han sido destinados a la media caña y los 3/5 restantes para el serpentín.



Esto implica que $Q = 1.07 \cdot 10^7 \frac{KJ}{h}$ deben ser absorbidos por el serpentín.

Del mismo modo que anteriormente se ha calculado el caudal de refrigerante necesario para disipar esa cantidad de calor.

$$Q = C_{pref} \cdot m_{ref} \cdot (T - T_0) = -1.07 \cdot 10^7 \frac{KJ}{h} = 4.18 \frac{KJ}{Kg \cdot ^\circ C} \cdot m_{ref} \cdot (30 - 15)$$

(ec. 11.2.1.30.)

$$m_{ref} = 163675,57 \frac{Kg}{h}$$

$$Q_{vref} = \frac{163675,57 \frac{Kg}{h}}{1000 \frac{Kg}{m^3}} = 163,67 \frac{m^3}{h}$$

Una vez obtenido el caudal, se fija una velocidad de paso de $2.5 \frac{m}{s}$, y se estima el área de paso del fluido refrigerante por el serpentín.

$$A_{paso\ Serpentín} = \frac{Q_{vref}}{v} = \frac{163,67 \frac{m^3}{h}}{2.5 \frac{m}{s} \cdot \frac{3600 s}{1 h}} = 0,018 m^2 \quad (\text{ec. 11.2.1.31.})$$

$$D_{int} = \frac{\sqrt{A_{paso} \cdot 8}}{\pi} = \sqrt{\frac{0.018 \cdot 8}{\pi}} = 0.1521 \approx 0.16m \quad (\text{ec. 11.2.1.32.})$$

Una vez estimado el diámetro del serpentín se le añaden 0.03 m de espesor. De este modo queda un **diámetro total externo de 0.22 m**.

$$A = \frac{q}{\Delta TML \cdot U} = \frac{-1.07 \cdot 10^7 \frac{KJ}{h}}{680 \frac{J}{s \cdot m^2} \cdot \frac{3600 s}{h} \cdot \frac{1 KJ}{1000 J} \cdot 60} = 69,053 m^2 \quad (\text{ec. 11.2.1.33.})$$



$$L = \frac{A}{\pi \cdot D_{ext}} = \frac{69,053 \text{ m}^2}{\pi \cdot 0.19 \text{ m}} = 102.8 \text{ m} \text{ (ec. 11.2.1.34.)}$$

Con el fin de obtener la altura del serpentín, se calcula la longitud que proporciona una vuelta del serpentín en el interior del reactor.

En este caso se ha tomado una distancia de $2/3$ el diámetro a fin de eliminar el calor desde el interior y al mismo tiempo no interferir en la eliminación de calor desde las paredes que absorbe la media caña. Además a esta distancia, el agitador opera de un modo correcto ya que existe suficiente distancia entre el serpentín y el agitador.

$$D_{vuelta\ serpentín} = \frac{2}{3} \cdot D_{Tanque} = \frac{2}{3} \cdot 3.8 \text{ m} = 2.53 \text{ m} \text{ (ec. 11.2.1.35.)}$$

$$L_{1\ vuelta} = D_{vuelta\ serpentín} \cdot \pi = 2.53 \text{ m} \cdot \pi = 7.97 \text{ m} \text{ (ec. 11.2.1.36.)}$$

$$n_{vueltas} = \frac{102.8 \text{ m}}{7.97 \text{ m}} = 12,89 \text{ m} \text{ (ec. 11.2.1.37.)}$$

Redondeando a la alza queda un número de vueltas igual a 13. De esta manera, ya se puede calcular la altura del serpentín en el tanque.

$$H_{Serpentín} = (D_{serpentín} + S) \cdot n_{vueltas} = (0.22 \text{ m} + 0.15 \text{ m}) \cdot 13 = 4.81 \text{ m}$$

(ec. 11.2.1.38.)

Finalmente se puede comprobar que la altura del serpentín es inferior a la altura del fluido en el reactor, este hecho indica que, del mismo modo que en el anterior caso de la media caña, todo el serpentín estará cubierto por el líquido y de esta manera se asegura la disipación del calor.



11.2.2. REACCIÓN DE TRANSPOSICIÓN DE BECKMANN (“BECKMANN REARRANGEMENT”)

La reacción de “Beckmann Rearrangement”, se da en el Área 300 de la planta y es el proceso donde se producirá el producto final de la planta, que es la caprolactama, a partir de la ciclohexanona oxima que proviene del Área 200.

El mecanismo de reacción de Beckmann (Jian et. al, Ogata et. al) es conocido por suceder en múltiples etapas, donde la ciclohexanona oxima será convertida en caprolactama, en una estequiométrica de 1 a 1. Según la literatura, estas múltiples etapas ocurren de manera prácticamente instantánea, caracterizando una cinética muy rápida con valores de K elevados. En la Figura 11.2.2.1., es posible observar dicho mecanismo de reacción.

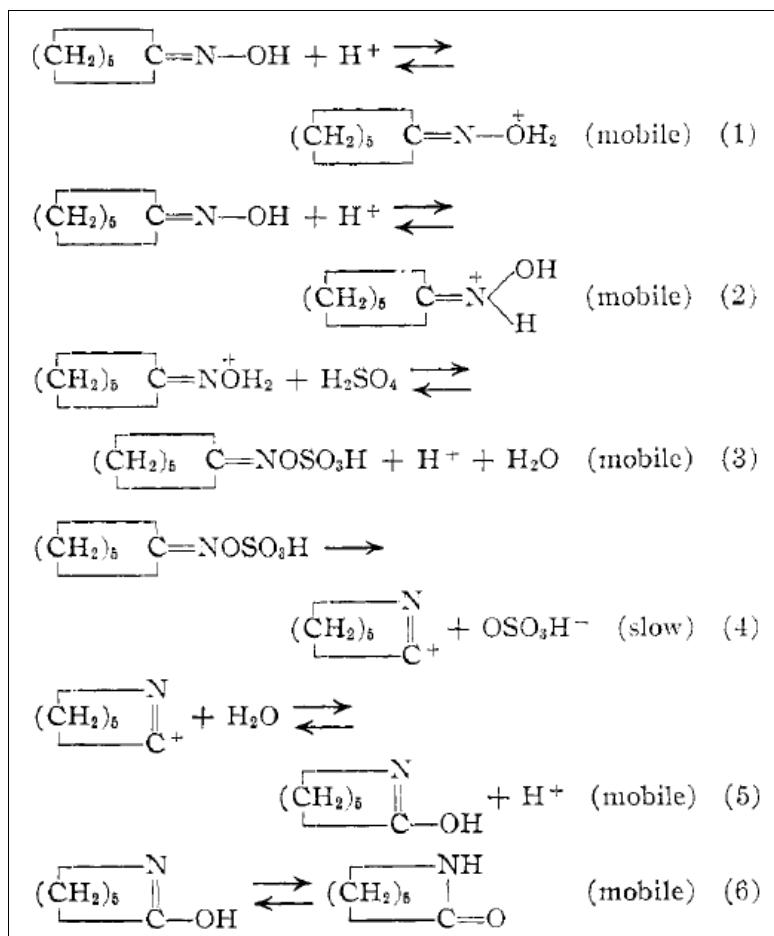




Figura 11.2.2.1- Mecanismo de Reacción del Beckmann Rearrangement.

Como se puede apreciar en la Figura 11.2.2.1., la reacción 4 es la etapa lenta, que es la salida del ión bisulfato, del complejo formado por la ciclohexanona oxima, agua y ácido sulfúrico.

En este proyecto no se estudiará a fondo la cinética del Beckmann por diversas razones. En primera estancia, es una cinética muy compleja; en segundo lugar, es una cinética casi instantánea. Es por eso, que no será necesario simular la cinética para poder diseñar el reactor. En este proyecto, el estudio para la producción de caprolactama será basado en patentes, donde otros parámetros de operación importantes sí son especificados.

Según las patentes, WO2004/113287 y EP-1633706 B1, la caprolactama puede ser producida a partir de una mezcla de ciclohexanona oxima y óleum (29%wt SO₃, 71%wt H₂SO₄), en un proceso en tres etapas, donde el SO₃ y el ácido sulfúrico son catalizadores para que la conversión de ciclohexanona oxima en caprolactama.

Según la patente, el óleum puede ser introducido al sistema de diferentes maneras, pero se ha comprobado que la mejor y más efectiva es añadirlo completamente a la primera etapa del proceso. De esta manera, se logra mantener una concentración de SO₃ elevada en la primera etapa, donde el caudal que circula es más grande. En la Figura 11.2.2.2., se puede observar una representación del área 300, con las tres etapas de reacción.

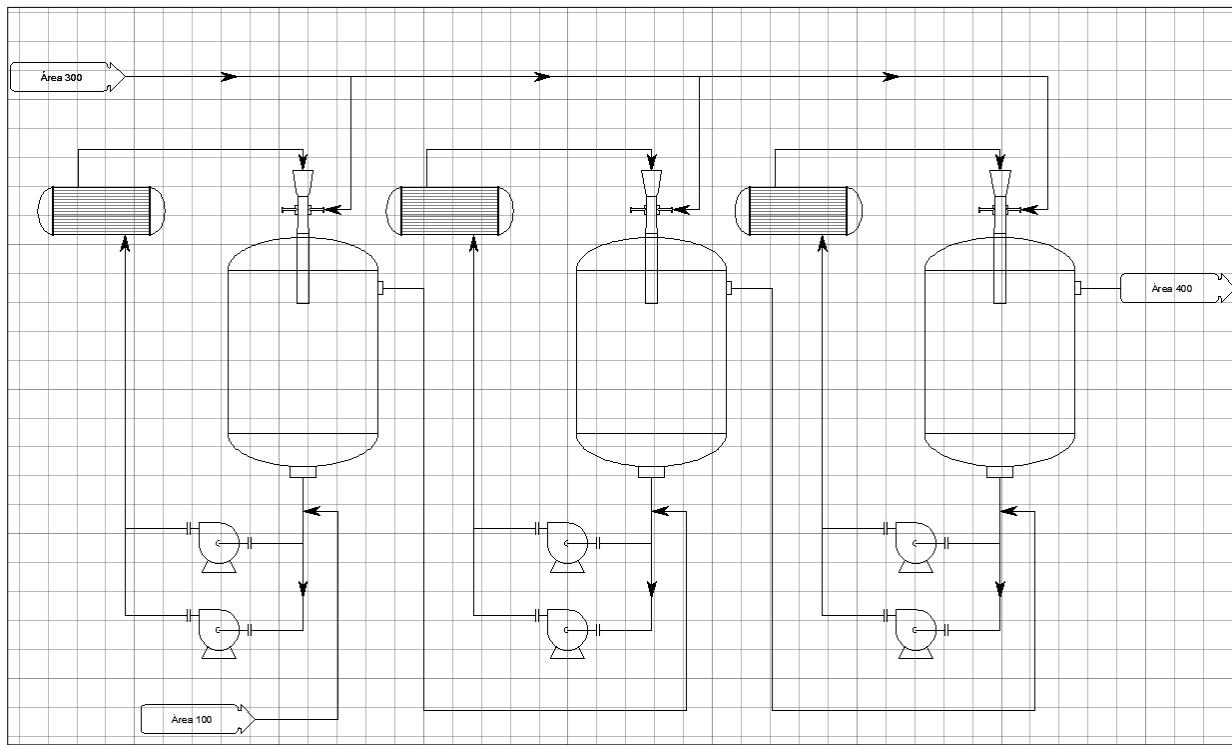


Figura 11.2.2.2.- Área 300 en tres etapas.

Cada etapa está compuesta por un reactor conectado a un tanque colector, dos bombas centrífugas y un intercambiador de calor. Como se puede ver en la Figura 11.2.2.2., la entrada al reactor se hace por la parte de arriba, como caudal de recirculación, y en el estrechamiento del reactor, se conecta la entrada de oxíma. En la salida del tanque, parte de la mezcla producida, es recirculada y parte se va a la siguiente etapa.

En la recirculación, a la mezcla resultante del reactor R-301, se conecta el caudal de Óleum que es introducido en el sistema únicamente, como ya se ha explicado, en la primera etapa. El producto resultante es bombeado hasta un intercambiador de calor de carcasa de y tubos, donde será enfriado y volverá a ser introducido en el reactor R-301. En la Figura 11.2.2.3., se puede observar como sería la estructura del conjunto reactor-tanque.

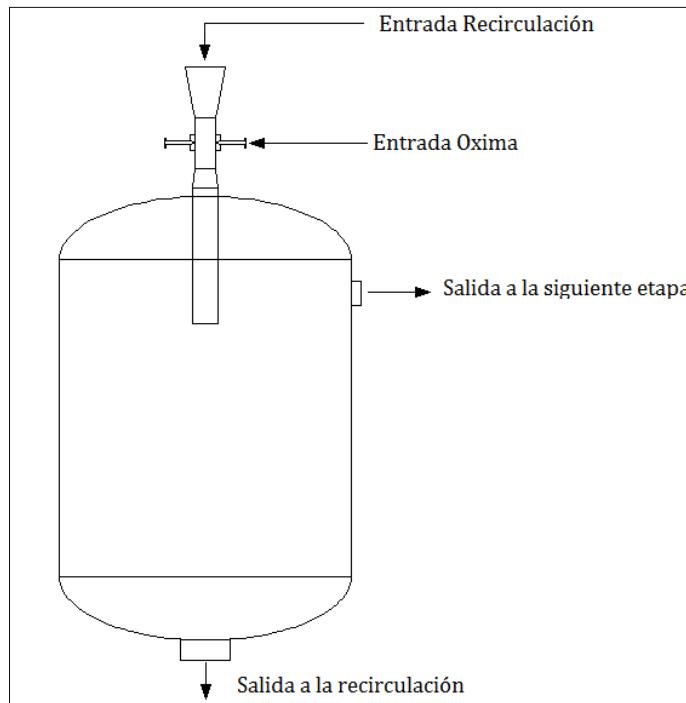


Figura 11.2.2.3.- Estructura del tanque-reactor para el Beckmann rearrangement.

La oxima que viene del Área 200, según las patentes debe tener como máximo un 7% de agua. El estar la oxima con bajas concentraciones de agua tiene la ventaja de que el contenido de SO_3 en la mezcla, sobretodo en la última etapa, sea superior a los 9%wt, y sea necesario añadir menos óleum al sistema. Desde un punto de vista económico es favorable también, porque además de ahorrar con la cantidad de óleum utilizada, menos subproducto (sulfato de amonio) se irá a formar en la posterior neutralización de la caprolactama.

En las patentes, se ha comprobado también, que la manera más eficaz de añadir la ciclohexanona oxima es introducir una gran parte de la oxima total en la primera etapa, y cantidades menores en las siguientes. A la primera etapa se añadirá el 70% de la oxima total del sistema, por lo tanto, por ésta circulará un caudal volumétrico muy superior a las otras etapas, lo que se reflejará en las dimensiones de los tanques, reactores y los elementos de cada etapa.



11.2.2.1. Parámetros de diseño

Para la síntesis de la caprolactama, tal y como indican las patentes, se han determinados algunos parámetros de diseño. El primero de ellos, es la razón molar, **M**, la cual está definida como:

$$M = (n_{SO_3} + n_{H_2SO_4}) / n_{Caprolactama}, \text{ (ec. 11.2.2.1.)}$$

Dónde:

- n_{SO_3} , cantidad de SO_3 en la mezcla, en moles
- $n_{H_2SO_4}$, cantidad de H_2SO_4 en La mezcla, en moles
- $n_{Caprolactama}$, cantidad de caprolactama en la mezcla, en moles

Es recomendable para una buena conversión que se introduzca una cantidad de Óleum justa como para mantener la concentración de SO_3 , entre los 9-20%wt. Será necesario que en la primera etapa los valores de M estén entre el rango de 1-1,4 respecto a la última etapa. Los valores de concentración de SO_3 , C_{SO_3} , en los reactores es otro parámetro de diseño. Es interesante que $C_{SO_3}(1)$ sea elevado para garantizar que $C_{SO_3}(2)$ también sea alto sin la necesidad de añadir más Óleum a la segunda etapa. A más, han comprobado que altos valores de $C_{SO_3}(2)$ y $C_{SO_3}(3)$, ha producido un aumento en la conversión de la oxima a caprolactama.

La cantidad de oxima alimentada en cada etapa, también es otro parámetro de diseño, y se ha comprobado que es interesante alimentar la mayor parte de la oxima total en la primera etapa (60-95%). Para el diseño de esta planta, se han utilizado los mismos porcentajes molares de oxima alimentada en cada etapa que en las patentes.



Las temperaturas, así como las concentraciones, son medidas dentro del tanque colector, y poseen un valor más elevado en el primero reactor, porque ahí es donde se está produciendo más cantidad de producto, y la reacción es de carácter exotérmico. Ya para las etapas 2 y 3, el volumen de producto producido es mucho menor así que el salto de temperatura no es tan pronunciado (25°C en la primera etapa en contraste con los 14°C en las etapas 2 y 3).

Dos parámetros más de diseño son las relaciones entre caudales volumétricos, w/W (w , caudal volumétrico de oxíma, W , caudal volumétrico de la mezcla de recirculación) y el v/V (v , velocidad de entrada de oxíma, V , velocidad de entrada de la mezcla). Todos los parámetros utilizados y sus rangos recomendables, así como las conversiones que se dan en cada reactor, están explicitadas en la Tabla 11.2.2.1.

Como se puede observar en la Tabla 11.2.2.1., todos los valores utilizados están dentro de los rangos recomendables, así que, en principio, los resultados que se han obtenido son fiables. Para más confirmación, se observa como las conversiones obtenidas tienen valores similares a los obtenidos por la patente.

Tabla 11.2.2.1.- Parámetros de diseño utilizados y sus rangos típicos.

	R301		R302		R303	
	Valores utilizados	Rangos típicos	Valores utilizados	Rangos típicos	Valores utilizados	Rangos típicos
M	1,7	1,5-1,7	1,35	1-1,4	1,2	1-1,4
C_{SO3}	16,82%wt	12-17 wt%	15,15%wt	12-17 wt%	14,28%wt	<18%wt
% Oxima	70,30%	60-95%	18,80%	5-40%	10,90%	2-15%
w/W	0,05	0,01-0,05	0,02	0,01-0,05	0,02	0,01-0,05
v/V	1,07	0,2-30	0,80	0,2-30	1,03	0,2-30
T	102°C	50-130°C	90°C	70-130°C	90°C	70-130°C



% Conversión	99,61%	96,22%	97,42%
---------------------	--------	--------	--------

11.2.2.2. Reactores R-301, R-302 y R-303

Los reactores R-301, R-302 y R-303, tienen un diseño muy peculiar. La corriente de recirculación que viene por la tubería en una velocidad típica entre 1-2 m/s (velocidad normal para un líquido), debe pasar por un estrechamiento de 11", para que el fluido alcance una velocidad de 41m/s (velocidad muy considerable para un líquido). Estudios analizados en estas patentes han demostrado que el régimen turbulento es el más adecuado para la producción de caprolactama. De hecho, se recomienda en dichas patente forzar Reynolds superiores a 5000 (Re>5000), e incluso por razones prácticas, generalmente superior a 100000 (Re>100.000).

Para poder alcanzar estos valores de Reynolds tan elevados es necesario una reducción apreciable en el diámetro por donde pasará el fluido, por eso la ciclohexanona oxima es introducida en el reactor a través de 8 tubos de 3mm de diámetro. De estos orificios, sólo 4 estarán abiertos a la vez, para que se pueda cambiar de agujeros en caso de que alguno de ellos se encuentre bloqueado por alguna impureza. Es gracias al estrechamiento que imponen estos orificios que se consiguen alcanzar las velocidades del orden de los 40m/s.

Después del estrechamiento, hay una expansión de la tubería que lleva a la mezcla al tanque colector. Los valores de Reynolds para el estrechamiento son elevados, suficientemente altos como para mantener la mezcla en un régimen turbulento, garantizando a la vez una buena agitación de la mezcla. Además, es importante observar que el conjunto reactor-tanque, no posee ningún tipo de agitación mecánica. La propia velocidad que tiene el líquido, será suficiente, y de hecho es también elevada, ya que tiene también el objetivo de producir una agitación hidráulica dentro del tanque. El tanque que acompaña a cada reactor, tiene como función también dar tiempo de residencia para la reacción y permitir que la



recirculación sea a una velocidad mucho más baja de la que se trabaja en el reactor. Otras de las funciones de dichos tanques será dar tiempo de residencia, y facilitar la mezcla y la disipación del calor generado por la exotermia. En la Tabla 11.2.2.2. están reunidos los parámetros de diseño de los reactores R-301, R-302 y R-303.

Tabla 11.2.2.2.- Datos de diseño de los reactores R-301, R-302 y R-303.

Diseño Reactores			
	R-301	R-302	R-303
Diámetro de entrada	8"	5"	5"
Velocidad de entrada (m/s)	1,7	1,7	1,1
Diámetro estrechamiento	1 1/4"	3/4"	3/4"
Velocidad en el estrechamiento (m/s)	44	47	32
Reynolds en el estrechamiento	2,61E+05	2,19E+05	1,40E+05
Caudal volumétrico mezcla (m³/s)	201,7	77,3	52,2
Caudal volumétrico oxima (m³/s)	4,75	1,27	0,736
Densidad mezcla (kg/m³)	1218	1250	1232
Viscosidad (Pa.s)	0,0065	0,005	0,0052

Como se puede ver en la Tabla 11.2.2.2., cada reactor fue diseñado para trabajar a unos caudales diferentes, sobretodo la etapa 1, donde el caudal de entrada al R-301 supera los 200 m³/h. Se había planteado diseñar el mismo reactor para las tres etapas, ya que sería una buena alternativa económica, por el hecho de sólo necesitar comprar un cuarto reactor de recambio. En cualquier caso, se observó que no era una opción viable, porque estos reactores están trabajando con caudales volumétricos muy dispares entre ellos, y aplicar el mismo reactor para las tres etapas, haría que no se cumplieran los parámetros de diseño de la patente. Finalmente se opta por tener un reactor específico para cada etapa de la transposición de Beckmann.



11.2.2.3. Tanques T-301, T-302 y T-303

Los tanques colectores T-301, T-302 y T-303, utilizados son de tipo cilíndricos con cabezal y fondo toriesféricos, y como cada uno trabaja a caudales diferentes, se hace necesario diseñar un tanque diferente para cada etapa. Para su diseño, se dividirá el cálculo por cada parte.

- Diseño de la parte cilíndrica:

Antes de empezar a calcular las dimensiones y espesores, es necesario determinar los volúmenes de cada tanque. Como se puede ver en la Tabla 11.2.2.2, los caudales a los que se trabaja en cada etapa son bastante diferentes, pero según la patente (EP-1633706 B1), para el “Beckmann Rearrangement” se recomienda un tiempo de residencia de 20 minutos en los tanques colectores. En la Tabla 11.2.2.3., están los valores calculados para los volúmenes necesarios en cada etapa en función del caudal y del tiempo de residencia.

Tabla 11.2.2.3.- Volúmenes de los tanques T-301, T-302 y T-303 según sus caudales.

	R-301	R-302	R-303
Caudal Volumétrico (m³/h)	201,7	77,3	52,2
Tiempo de residencia (h⁻¹)	0,333	0,333	0,333
Volumen (m³)	85	32	22

- Cálculo de las dimensiones:

Para el diseño de la parte cilíndrica se ha decidido que la altura sea unas 2 veces más grande que el diámetro del tanque. Como ya se ha calculado anteriormente y



como se hará con las ecuaciones 11.2.3.4 y 11.2.3.5 en el reactor de neutralización. Las alturas y los diámetros de cada tanque están reunidos en la Tabla 11.2.2.4.:

Tabla 11.2.2.4.- Volúmenes de los tanques T-301, T-302 y T-303 según sus caudales.

	T-301	T-302	T-303
Altura (m)	7,6	5,4	4,8
Diámetro (m)	3,8	2,7	2,4

▪ Cálculo del espesor:

El cálculo del espesor depende de parámetros de operación como temperatura y presión, diámetro interno, factor de soldadura (E) y límite elástico o factor de estrés (S). Este último parámetro depende del material utilizado para construir el tanque. Como se está trabajando con materiales corrosivos como óleum, es recomendado utilizar el acero inoxidable AISI 316-L, cuyo límite elástico depende de la temperatura de operación. En la Tabla 11.2.3.5, están los valores de límite elástico para este acero en función de la temperatura, donde para las temperaturas de operación se han interpolado los valores de límite elástico. El factor de soldadura, como se trata de tanques que operan a presión, se ha decidido utilizar soldaduras simples con radiografiado total, de manera que E=1,0.

Como se calcula con las ecuaciones 11.2.3.5 y 11.2.3.6 en el reactor de neutralización, se pueden calcular las temperaturas y las presiones en que se trabaja en cada tanque. Una vez determinados todos los otros parámetros que son necesarios para calcular el espesor del los tanques, se ha utilizado la ecuación 11.2.3.8 y los resultados están recogidos en la Tabla 11.2.2.5.

Tabla 11.2.2.5.- Parámetros para el cálculo y el espesor del cilindro para los tanques T-301, T-302 y T-303.



	T-301	T-302	T-303
Presión de diseño (atm)	2,0	2,0	2,0
Radio (mm)	1888	1361	1189
Tensión máxima admisible (atm)	1191,0	1205,1	1205,1
Factor de soldadura	1	1	1
Tolerancia a corrosión (mm)	1,5	1,5	1,5
Tolerancia a la fabricación (mm)	1	1	1
Espesor (mm)	9	7	6

11.2.2.4. Diseño del cabezal

- Cálculo de las dimensiones:

Como se tratan de cabezales toriesféricos, que favorecen la mezcla de los compuestos que hay en los tanques, según la normativa ASME (“American sociaety of Mechanical Engineers”), sus dimensiones pueden ser calculadas a partir de la Tabla 11.2.3.7, y los valores de los parámetros calculados con las ecuaciones 11.2.3.11 a 11.2.3.16, están reunidos en la Tabla 11.2.2.6.

Tabla 11.2.2.6.- Especificaciones de los cabezales según la normativa ASME para los tanques T-301, T-302 y T-303.

	T-301	T-302	T-303
Volumen	0,31	0,22	0,19
Área	13,27	6,90	5,27
Altura	0,64	0,46	0,40
r_1	3,8	2,7	2,4
r_2	0,38	0,27	0,24
h_1	13,21	9,53	8,32
h_2	0,73	0,52	0,46
h_3	13,94	10,05	8,78



- Cálculo del espesor:

De la misma manera que se ha calculado el espesor para la pared del cilindro, el espesor de cabezal dependerá de los valores de temperatura y presión de diseño, factor de soldadura y límite elástico del material. Todos estos factores tendrán el mismo valor que en el caso anterior. En este caso, se ha utilizado la ecuación 11.2.3.9, en que un nuevo parámetro aparece diferente de la ecuación 11.2.3.8, M , que es un factor que depende de la relación R/r_2 , donde r_2 se ha asumido que será el 10% del diámetro interno, por lo tanto, la relación tendrá un valor de 10. En la Tabla 11.2.3.6, están los valores de M en función de R/r_2 , que se ha interpolado como 1,54, y con la ecuación 11.2.3.9, se ha calculado el espesor del cabezal.

Tabla 11.2.2.7.- Espesores de los cabezales de los tanques T-301, T-302 y T-303.

	T-301	T-302	T-303
Espesor del cabezal (mm)	7	6	6

11.2.2.5. Diseño del fondo

- Cálculo del espesor

El fondo de los tanques también serán toriesféricos, con el fin de proporcionar una mejor mezcla dentro del reactor. Las dimensiones serán iguales a las calculadas para el cabezal, excepto el grosor porque hay que tener en cuenta que el fondo está trabajando a una presión superior por el efecto de la presión hidráulica que ejerce la columna del líquido.

A partir de la ecuación 11.2.3.10, se ha calculado la presión ejercida por la columna del líquido, en que al valor final se añade un 15% de sobredimensionamiento como margen de seguridad. Los valores de espesor del los fondos, así como las



presiones en que se está trabajando los fondos de los tanques están reunidos a la Tabla 11.2.2.8.

Tabla 11.2.2.8.- Presiones de trabajo y espesores de los fondos de los tanques T-301, T-302 y T-303.

	T-301	T-302	T-303
Presión en el fondo (atm)	4,9	4,6	4,6
Espesor del fondo (mm)	9	7	6

11.2.2.6. Peso del reactor

El peso total de los tanques, será igual al peso del tanque vacío más el peso del fluido que ellos contendrán. El peso del tanque vacío será la suma del peso del cilindro más el peso del cabezal, más el fondo. A partir de las ecuaciones 11.2.3.18 a 11.2.3.20, se ha podido calcular el peso de cada parte, así como el peso del líquido dentro de cada tanque, de manera que todos los valores se pueden ver en la Tabla 11.2.2.9..

Tabla 11.2.2.9.- Peso de los tanques T-301, T-302 y T-303

	T-301	T-302	T-303
Peso del cabezal (kg)	2589	1091	772
Peso del cilindro (kg)	3085	1274	893
Peso del fondo (kg)	2972	1193	831
Peso tanque vacío (kg)	8645	3558	2496
Peso líquido interior (kg)	102954	39622	26034
Peso total del tanque (kg)	111599	43180	28530



11.2.3. REACTOR DE NEUTRALIZACIÓN DE ÁCIDO SULFÚRICO (R-401)

11.2.3.1. Introducción

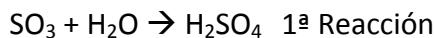
En este reactor se lleva a cabo la reacción de neutralización del ácido sulfúrico. Es importante neutralizarlo, ya que la ϵ -caprolactama ha salido de la transposición de Beckmann disuelta en ácido, formando lo que se conoce como crudo de ϵ -caprolactama, y el objetivo del proceso es obtener la ϵ -caprolactama lo más pura posible. Para ello, se introduce una corriente con amoníaco disuelto en agua, el cual reaccionará con el ácido sulfúrico para formar sulfato de amonio.

El sulfato de amonio es un subproducto que con la purificación adecuada podrá ser comercializado.

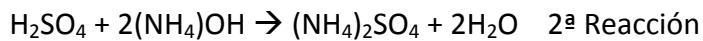
El reactor será un tanque continuo, agitado e isotermo.

11.2.3.2. Reacción y condiciones de operación

En éste reactor se producen dos reacciones. Por una banda, el óxido de azufre al disolverse en agua forma ácido sulfúrico:



Por otra, la reacción principal, en la cual todo el ácido sulfúrico es neutralizado por la disolución de amonio en agua para dar sulfato de amonio:



Los productos que resultaran en el reactor después de darse las reacciones, serán agua, sulfato de amonio y ϵ -caprolactama, que ya no estará en forma de crudo, sino formando una fase aceitosa con agua.



Las dos reacciones son cinéticamente muy rápidas, de hecho, no es necesario simular el modelo cinético, ya que como bien sugiere la patente WO 2012/019674 A2, el tiempo de residencia puede oscilar entre los 2 segundos y los 15 minutos. En cualquier caso, la reacción de neutralización se puede considerar casi instantánea, siendo el tiempo de residencia más útil para favorecer la mezcla, que no para permitir la reacción. En esta misma patente también se recomienda un tiempo de residencia de 4 minutos, que es el que precisamente se ha escogido para hacer el diseño.

Otro punto importante es a las condiciones a las que se va a hacer la neutralización. Se decide trabajar a 160°C por tal de aprovechar mejor la exotermia de la reacción. Al trabajar a esta temperatura y tener un sistema de refrigeración para mantener el reactor isotermo, se obtiene vapor de alta provocando un cambio de estado al líquido refrigerante. Como consecuencia, se debe trabajar a una presión más elevada (6,12 bares \rightarrow 6,2 bares) por tal de que no se vaporice el agua presente en el reactor y cristalice el sulfato de amonio formado a lo largo de la neutralización.

La reacción de neutralización es extremadamente exotérmica. De hecho, el calor que se genera es tan grande, que con el volumen de reactor adecuado para el caudal que se desea obtener, no hay superficie disponible como para hacer una media caña capaz de refrigerar la vasta cantidad de calor generada manteniendo el reactor isotérmico. La solución que se encuentra es recircular parte del caudal de salida del reactor de nuevo a éste, pero refrigerándolo previamente en un intercambiador de calor. El cálculo del caudal necesario a recircular para mantener el reactor isotermo se especifica en el apartado 11.2.3.4. Balance de energía.

11.2.3.3. Características de las corrientes

Como ya se ha especificado hay tres corrientes de entrada. Una corriente de entrada proviene de la transposición de Beckmann (Área 300), y contiene ε -caprolactama, ácido sulfúrico y óxido de azufre. Éste último reaccionará con el agua al entrar en contacto con ésta para dar ácido sulfúrico.



Por otro lado, la segunda corriente de entrada deberá estar compuesta por amoníaco disuelto en agua. Esta solución contendrá el amonio estequiométrico para neutralizar todo el ácido sulfúrico y un 10% de exceso con el fin de asegurar la reacción completa. El agua mínima necesaria será la mínima suficiente como para disolver todo el amoníaco; se conoce que una solución a 25ºC tiene un composición del 30% en peso máximo de amoníaco (Robert H. Perry, 2008). Además, deberá entrar exceso de agua; por una banda porque debe reaccionar con las trazas de óxido de azufre. También se debe tener en cuenta que el agua ha de ser suficiente como para tener el sulfato de amonio que se formara disuelto sin llegar a tener una solución saturada.

Como ya se ha dicho, la tercera corriente será la recirculación refrigerada necesaria del corriente de salida del reactor para mantener a éste en condiciones isotérmicas a 160ºC.

En la Tabla 11.2.3.1.,y 11.2.3.2., se pueden observar las diferentes especificaciones para las tres corrientes de entrada y para la corriente de salida respectivamente

Tabla 11.2.3.1.- Especificaciones de las corrientes de entrada a R-401.

CORRIENTE 54	%W	W(Kg/h)	ρ (kg/m ³)	Q (m ³ /h)
ϵ-caprolactama	0,51	6370,896		
H_2SO_4	0,35	4387,84		
SO_3	0,14	1792,29		
Total		12551,02	1299	9,66
CORRIENTE 65	%W	W(Kg/h)	ρ (kg/m ³)	Q (m ³ /h)
$(NH_4)OH$	0,26	5174,33		



H₂O	0,74	15103,29		
Total		20277,62	924,4	21,94
CORRIENTE 56	%W	W(Kg/h)	ρ (kg/m ³)	Q (m ³ /h)
ϵ-caprolactama	0,19	65767,39		
(NH₄)₂SO₄	0,27	91558,01		
(NH₄)OH	0,01	4854,30		
H₂O	0,52	176721,13		
Total		338900,84	1171,26	281,35

Tabla 11.2.3.2.- Especificaciones de la corriente de salida a R-402.

CORRIENTE 55	%W	W(Kg/h)	ρ (kg/m ³)	Q (m ³ /h)
CPL	0,19	72138,29		
(NH₄)₂SO₄	0,27	100427,25		
(NH₄)OH	0,01	5324,54		
H₂O	0,52	193840,13		
Total		371730,21	1165,58	318,92

Teniendo en cuenta que se trata de un reactor continuo y agitado, ya se puede conocer el volumen mínimo de reacción que se requiere, haciendo el producto del caudal volumétrico total de entrada o salida y el tiempo de residencia:



$$V_{reacción} = Q \cdot \tau = (9,66 + 21,94 + 281,35) \frac{m^3}{h} \cdot \frac{1h}{60\ min} \cdot 4\ min = 20,86\ m^3$$

$$\approx 21\ m^3$$

11.2.3.4. Balance de energía

Como se ha explicado, un punto clave en este equipo es la refrigeración del calor generado por la exotermia de la reacción. En este apartado se procederá a calcular la energía en forma de calor resultante de la reacción de neutralización, así como el caudal que se deberá refrigerar y recircular al reactor para mantenerlo isotermo.

Para empezar se calculan las entalpías de reacción de las reacciones que se dan en el reactor. Para ello se han utilizado las entalpías de formación presentes en la Tabla 11.2.3.3.y la ecuación 11.2.3.1.

$$\Delta H_r = \sum \Delta H_f (\text{productos}) - \sum \Delta H_f (\text{reactivos}) \quad (\text{Ec. 11.2.3.1})$$

Tabla 11.2.3.3.- Entalpías de los compuestos intervenientes en las reacciones de R-402 (Robert H. Perry, 2008)

Compuesto	ΔH_f (KJ/mol)
$(\text{NH}_4)\text{OH}$	-80,8
H_2O	-285,8
H_2SO_4	-814,0
$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$	-1180,9



SO₃(g)	-395,7
Compuesto	ΔH_{vap} (KJ/mol)
SO₃	42,55

Primero es necesario calcular la entalpía de formación del óxido de azufre en estado líquido, a partir de su entalpía en estado gas y de vaporización:

$$\Delta H_f(\text{SO}_3(\text{l})) = -395,7 - 42,55 = -438,25 \text{ KJ/mol}$$

A continuación ya se puede calcular la entalpia de reacción del óxido de azufre con el agua para pasar a ácido sulfúrico (1^a Reacción):

$$\Delta H_r^0 1 = (1 \cdot (-814,0)) - (1 \cdot (-438,25) + 1 \cdot (-285,8)) = -89,95 \text{ KJ/mol}$$

También se puede calcular la de la segunda y reacción principal, la neutralización del ácido sulfúrico:

$$\begin{aligned} \Delta H_r^0 2 &= (2 \cdot (-285,8) + 1 \cdot (-1180,9)) - (1 \cdot (-814,0) + 2 \cdot (-80,8)) = \\ &= -776,9 \text{ KJ/mol} \end{aligned}$$

Ahora ya se puede calcular el calor generado por cada una de las reacciones exotérmicas. Se hace mediante la ecuación 11.2.3.2.



$$q = -\frac{n_{k0}}{\gamma_k} \cdot X_k \cdot \Delta H_r^0 \quad (\text{Ecuación 11.2.3.2})$$

Dónde:

- q , es el calor en KJ/h
- n_{k0} , es el caudal en moles del componente clave en mol/h
- γ_k , es el coeficiente estequiométrico del componente clave
- X_k , es el grado de conversión de la reacción
- ΔH_r^0 , es la entalpía estándar de reacción en KJ/mol

En la primera reacción el componente clave es el óxido de azufre y se supone una conversión completa. De esta manera, se obtiene en el caso de la primera reacción:

$$q_1 = -\frac{22385,1 \text{ (mol/h)}}{-1} \cdot 1 \cdot \left(-89,95 \left(\frac{\text{KJ}}{\text{mol}} \right) \right) = -2013539,75 \text{ KJ/h}$$

Y en el caso de la segunda reacción, teniendo en cuenta también una conversión completa y que el componente clave es el ácido sulfúrico:

$$q_2 = -\frac{67122,41 \text{ (mol/h)}}{-1} \cdot 1 \cdot \left(-776,9 \left(\frac{\text{KJ}}{\text{mol}} \right) \right) = -52147400,33 \text{ KJ/h}$$

De manera, que el calor total generado en el reactor será la suma de los dos calores generados por la reacción:

$$q_{TOTAL} = q_1 + q_2 = (-2013539,75) + (-52147400,33) = -54160940,08 \text{ KJ/h}$$



Ahora bien, hay que tener en cuenta que las corrientes de entrada no están precalentadas, es decir, que no entran a 160°C, sino a una temperatura inferior, y que por lo tanto gastaran parte del calor generado por las reacciones exotérmicas para llegar a la temperatura del contenido del reactor; por muy pequeña que sea la cantidad de calor consumida. Para calcular este calor se utiliza la ecuación 11.2.3.3.

$$q = m \cdot C_p \cdot (T_{reactor} - T_{entrada}) \quad (\text{Ecuación 11.2.3.3})$$

Dónde:

- q , calor que se consumirá al calentar el corriente en KJ/h
- m , caudal mísico en kg/h
- C_p , calor específico de la mezcla en KJ/kg·°C
- $T_{reactor}$, temperatura a la que se encuentra el reactor en °C
- $T_{entrada}$, temperatura del corriente de entrada en °C

La corriente 54, tiene un calor específico de $1,608 \text{ KJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{°C}^{-1}$. En la Tabla 11.2.3.4. se encuentran los calores específicos de los componentes de la corriente 65. Estos están en unidades mísicas, por tanto, para calcular el calor específico de la mezcla, se pondera con los porcentajes en peso de cada corriente, los cuales están indicados en la Tabla 11.2.3.3.

Tabla 11.2.3.3.- Calores específicos de los compuestos del corriente 65 (Robert H.

Perry, 2008)

Compuesto	$C_p \left(\frac{\text{KJ}}{\text{Kg} \cdot \text{°C}} \right)$
(NH ₄)OH	4,7



Por tanto, el corriente 65 tendrá un calor específico de mezcla de:

$$C_p = 0,74 \cdot 4,18 + 0,26 \cdot 4,7 = 4,32 \frac{KJ}{Kg \cdot ^\circ C}$$

Seguidamente se procede a calcular el calor necesario para enfriar el corriente 54, teniendo en cuenta que éste entra a una temperatura de 90°C:

$$q_{c1} = 12551,02 \left(\frac{Kg}{h} \right) \cdot 1,608 \left(\frac{KJ}{Kg \cdot ^\circ C} \right) \cdot (160 - 90)(^\circ C) = 1412742,81 KJ/h$$

De igual manera con la corriente 65, pero a diferencia, ésta entra a una temperatura de 24,32 °C:

$$q_{c2} = 20277,62 \left(\frac{Kg}{h} \right) \cdot 4,32 \left(\frac{KJ}{Kg \cdot ^\circ C} \right) \cdot (160 - 24,32)(^\circ C) = 11885475,52 KJ/h$$

Ahora ya se puede calcular el calor que se tendrá que eliminar refrigerando una parte del caudal de salida y que será recirculado:

$$\begin{aligned} q_{eliminar} &= q_{TOTAL} + q_{c1} + q_{c2} = -54160940,08 + 1412742,81 + 11885475,52 \\ &= -40862721,75 \frac{KJ}{h} \end{aligned}$$



Por último, se calcula el caudal que será necesario recircular para mantener el reactor a una temperatura constante de 160°C. Teniendo en cuenta esto, se decide que el caudal a refrigerar pase de los 160°C a los 125°C. De la misma manera que antes, se utiliza la ecuación 11.2.4.3., y también se calcula el calor específico de la mezcla a partir de los calores específicos de la Tabla 11.2.3.4, ponderándolos con los porcentajes másicos indicados en la Tabla 11.2.4.1..

Tabla 11.2.3.4.- Calores específicos de los compuestos del corriente 56 (Robert H. Perry, 2008)

Compuesto	C_p ($\frac{KJ}{Kg \cdot ^\circ C}$)
(NH ₄)OH	4,7
(NH ₄) ₂ SO ₄ en H ₂ O	3,757
ε-caprolactama	2,08

De esta manera, el corriente a refrigerar tendrá un calor específico de:

$$C_p = 0,1941 \cdot 2,08 + 0,0143 \cdot 4,7 + 0,7916 \cdot 3,757 = 3,44 \frac{KJ}{Kg \cdot ^\circ C}$$

Substituyendo en la ecuación 11.2.3.3., considerando el calor a eliminar, se aísla el caudal másico, y se obtiene que se deben recircular:



$$m = \frac{40862721,75 \frac{KJ}{h}}{3,44 \frac{KJ}{Kg \cdot ^\circ C} \cdot (160 - 125)(^\circ C)} = 338900,84 \text{ kg/h}$$

11.2.3.5. Diseño mecánico

- ESPESOR DE LA PARTE CILÍNDRICA:

De forma general, se suele considerar que la altura del reactor sea unas 2 veces más grande que el diámetro del reactor. Partiendo de esta suposición, y resolviendo el sistema de ecuaciones formado por las ecuaciones 11.2.3.4 y 11.2.3.5, se encuentra el valor del diámetro interno y la altura del tanque.

$$H_{cilindro} = 2 \cdot D_{cilindro} \text{ (Ecuación 11.2.3.4)}$$

$$V_{cilindro} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{cilindro}^2 \cdot H_{cilindro} = 21 \text{ m}^3 \text{ (Ecuación 11.2.3.5)}$$

Se obtiene de esta manera una altura del cilindro de 4,75 m y diámetro de 2,37 m.

Como en todos los casos anteriores, para calcular el espesor de la pared del tanque es necesario conocer ciertas condiciones de operación como son temperatura, presión, diámetro interno, factor de soldadura (E) y límite elástico o factor de estrés (S).

Se determinan temperatura y presión de diseño con las ecuaciones 11.2.3.6 y 11.2.3.7 respectivamente.



$$T_{diseño} = T_{operación} + 20^{\circ}\text{C} = 160^{\circ}\text{C} + 20^{\circ}\text{C} = 180^{\circ}\text{C} \quad (\text{Ecuación 11.2.3.6})$$

$$P_{diseño} = P_{operación} + 2 \text{ atm} = (6,12 - 1) + 2 \text{ atm} = 7,12 \text{ atm} \quad (\text{Ecuación 11.2.3.7})$$

En cuanto al factor de soldadura, como se trata de un equipo que trabaja a presión, se decide hacer soldaduras simples con radiografiado total, de manera que $E=1,0$.

La tensión máxima admisible, S , es sabido que depende del material de construcción. Para decidir el material de construcción, como se ha hecho en equipos anteriores, se ha consultado la guía de la empresa “*Harrington Industrial Plastics*”. A pesar de que compuestos como la caprolactama, el agua o el sulfato de amonio presentan compatibilidad excelente con más materiales, el amoníaco y el óleum son muy corrosivos, limitando la elección a acero inoxidable AISI 304-L. El límite elástico se puede leer en la Tabla 11.2.3.5. (interpolando), y para la temperatura de diseño tiene un valor de 15600 psi (1061,52) atm.

Tabla 11.2.3.5.-Tensión máxima admisible en función de la temperatura para el acero inoxidable AISI 304 L

Specification		Maximum Allowable Stress, ksi (Multiply by 1000 to Obtain psi), for Metal Temp., °F, Not Exceeding									
Number	Grade	-20 to 100	200	300	400	500	600	650	700	750	800
SA-240	304	18,8	17,8	16,6	16,2	15,9	15,9	15,9	15,9	15,5	15,2
SA-240	304L	15,7	15,7	15,3	14,7	14,4	14	13,7	13,5	13,3	13
SA-240	316	18,8	18,8	18,4	18,1	18,0	17,0	16,7	16,3	16,1	15,9
SA-240	316L	15,7	15,7	15,7	15,5	14,4	13,5	13,2	12,9	12,6	12,4



Ahora, con la ecuación 11.2.3.8., ya se puede calcular el espesor de la parte cilíndrica del reactor R-401.

$$t_{cilindro} = \frac{P_d \cdot R}{S \cdot E + 0,4 \cdot P_d} + C_1 + C_2 \quad (\text{Ecuación 11.2.3.8})$$

Dónde:

- $t_{cilindro}$, es el espesor de la parte cilíndrica en mm
- P_d , es la presión de diseño en atm
- R , es el radio de la parte cilíndrica en mm
- S , es la tensión máxima admisible en atm
- E , es el factor de soldadura
- C_1 , es la tolerancia a la corrosión en mm
- C_2 , es la tolerancia a la fabricación en mm

Igual que en los casos anteriores, C_1 tendrá un valor de 1,5 mm y C_2 , un valor de 1 mm. Substituyendo y redondeando al alza:

$$t_{cilindro} = \frac{7,12 \cdot \left(\frac{2370}{2}\right)}{1061,52 \cdot 1 + 0,4 \cdot 7,12} + 1,5 + 1 = 10,43 \text{ mm} \rightarrow 11 \text{ mm}$$

▪ ESPERSOR DEL CABEZAL TORIESFÉRICO:

En este equipo, el reactor R-401, se ha decidido que el cabezal sea toriesférico, ya que éste favorecerá la mezcla de los compuestos que hay en el reactor.

De igual forma que para el cálculo del espesor de la pared, se deben conocer temperatura y presión de diseño, factor de soldadura y límite elástico del material. Todos estos factores tendrán el mismo valor con el caso anterior.



A continuación ya se puede proceder a estimar el espesor del cabezal. Para hacerlo se debe aplicar la ecuación 11.2.3.9.

$$t_{cabezal} = \frac{P_d \cdot R \cdot M}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P_d} + C_1 + C_2 \quad (\text{Ecuación 11.2.3.9})$$

Dónde:

- $t_{cabezal}$, es el espesor del cabezal toriesférico en mm
- P_d , es la presión de diseño en atm
- R , es el radio interno en mm
- S , es la tensión máxima admisible en atm
- E , es el factor de soldadura
- C_1 , es la tolerancia a la corrosión en mm
- C_2 , es la tolerancia a la fabricación en mm
- M , factor que depende de la relación R/r_2

En la Tabla 11.2.3.6., se especifican los valores que tiene el factor M, según la relación r_1/r_2 . Como se puede observar en la Tabla 11.2.3.7., se ha asumido que r_2 será el 10% del diámetro interno, siendo r_1 igual al diámetro interno; por consecuencia, la relación de ambos tendrá un valor de 10, y el factor M tendrá un valor de 1,54.

Tabla 11.2.3.6.-Valores del factor M en función de la relación R/r_2

R/r_2	M	R/r_2	M	R/r_2	M	R/r_2	M
1,00	1,00	3,00	1,18	6,50	1,39	10,50	1,56
1,25	1,03	3,25	1,20	7,00	1,41	11,00	1,58
1,50	1,06	3,50	1,22	7,50	1,44	11,50	1,60
1,75	1,08	4,00	1,25	8,00	1,46	12,00	1,62
2,00	1,10	4,50	1,28	8,50	1,48	13,00	1,65



2,25	1,13	5,00	1,31	9,00	1,50	14,00	1,69
2,50	1,15	5,50	1,34	9,50	1,52	15,00	1,72
2,75	1,17	6,00	1,36	10,00	1,54	16,00	1,75
							16 2/3 1,77

Otra suposición que se hará, es que el diámetro interno de los cabezales será igual al de la parte cilíndrica.

Substituyendo y redondeando al alza se obtiene:

$$t_{cabezal} = \frac{7,12 \cdot \left(\frac{2370}{2}\right) \cdot 1,54}{2 \cdot 1061,52 \cdot 1 - 0,2 \cdot 7,12} + 1,5 + 1 = 8,62 \text{ mm} \rightarrow 9 \text{ mm}$$

▪ ESPESOR DEL FONDO:

En el caso del cabezal inferior, también se ha escogido un cabezal normalizado tipo Klopper. Todos los parámetros de diseño serán iguales, a diferencia de la presión, ya que éste deberá soportar también la presión que ejerce la columna del líquido. Para determinar dicha presión, se hace uso de la ecuación 11.2.3.10.

$$\Delta P = \rho \cdot g \cdot h_{líquido} \quad (\text{Ecuación 11.2.3.10})$$

$$\Delta P = 1165,58 \frac{kg}{m^3} \cdot 9,8 \frac{m}{s^2} \cdot 4,75 m = 54257,75 Pa = 0,5355 atm$$

La presión para el espesor, será entonces:



$$P = \Delta P + P_{diseño} = 0,5355 + 7,12 = 7,6555 \text{ atm}$$

Entonces, substituyendo y redondeando a la alza, como el caso anterior, en la ecuación 11.2.3.9., se obtiene el espesor del cabezal.

$$t_{cabezal} = \frac{7,6555 \cdot \left(\frac{2370}{2}\right) \cdot 1,54}{2 \cdot 1061,52 \cdot 1 - 0,2 \cdot 7,6555} + 1,5 + 1 = 8,99 \text{ mm} \rightarrow 9 \text{ mm}$$

- DIMENSIONES DE LOS CABEZALES:

Según la normativa ASME (“American sociaety of Mechanical Engineers”), las dimensiones de cualquier cabezal se pueden calcular de acuerdo con las correlaciones de la Tabla 11.2.3.7.:

Tabla 11.2.3.7.-Parámetros del cabezal toriesférico

Tipo de Cabezal	Toriesférico ASME
Volumen	0,08089·D ³
Área	0,931·D ₀ ³
Altura	0,169·D
r₁	D
r₂	0,1·D
h₁	3,5·t
h₂	0,1935·D-0,455·t
h₃	h ₁ + h ₂



Teniendo en cuenta que el diámetro interno del cabezal será igual que el del decantador, como se ha explicado en el apartado anterior, se dimensiona el cabezal:

$$h_1 = 3,5 \cdot t = 3,5 \cdot 9 \cdot 10^{-3} = 0,0315 \text{ m} \quad (\text{Ecuación 11.2.3.11})$$

$$h_2 = 0,1935 \cdot D - 0,455 \cdot t = 0,1935 \cdot 2,37 - 0,455 \cdot 9 \cdot 10^{-3} = 0,4545 \text{ m} \quad (\text{Ecuación 11.2.3.12})$$

$$h_3 = h_1 + h_2 = 0,0315 + 0,4545 = 0,486 \quad (\text{Ecuación 11.2.3.13})$$

$$V_{cabezal} = 0,08089 \cdot D^3 = 0,08089 \cdot (2,37\text{m})^3 = 1,0768 \text{ m}^3 \quad (\text{Ecuación 11.2.3.14})$$

De la misma manera, se pueden calcular los parámetros del fondo toriesférico; como éste tiene el mismo espesor que el cabezal, los parámetros serán los mismos.

A continuación, ya es posible estimar el volumen total del tanque:

$$V_{tanque} = V_{cilindro} + V_{cabezal} + V_{fondo} = 21 + 2 \cdot 1,0768 = 23,15 \text{ m}^3 \quad (\text{Ecuación 11.2.3.15})$$

Ahora, es posible conocer también la altura total del tanque:



$$H_{tanque} = H_{cilindro} + H_{cabezal} + H_{fondo} = 4,75 + 2 \cdot 0,486 = 5,722 \text{ m} \quad (\text{Ecuación 11.2.3.16})$$

11.2.3.6. Peso total del reactor R-401

El peso total del reactor será el peso de éste más el del líquido que contendrá. Primero se calcula el peso del tanque vacío con la ecuación 11.2.3.17.:

$$P_{vacío} = P_{cilindro} + P_{cabezas} \quad (\text{Ecuación 11.2.3.17})$$

Dónde:

- $P_{cilindro}$, es el peso de la parte cilíndrica (sin las tapas) en kg
- $P_{cabezas}$, es el peso de los cabezales toriesféricos en kg

Entonces, en primera instancia, se deben estimar estos pesos con las ecuaciones 11.2.3.18. y 11.2.3.19.:

$$P_{cabezas} = 2 \cdot (V_{cabezal chapa} \cdot \rho_{AISI316L}) = 2 \cdot \{[\frac{2}{3} \cdot \pi \cdot ((R + t_{cabezal})^3 - R^3)] \cdot \rho_{AISI316L}\} \quad (\text{Ecuación 11.2.3.18})$$

$$P_{cilindro} = A_{cilindro sin tapas} \cdot t_{cilindro} \cdot \rho_{AISI316L} = \pi \cdot D \cdot h_{cilindro} \cdot t_{cilindro} \cdot \rho_{AISI316L} \quad (\text{Ecuación 11.2.3.19})$$

Dónde:

- $\rho_{AISI316L}$, es la densidad del acero inoxidable AISI 304-L en kg/m³
- $V_{cabezal chapa}$, es el volumen de chapa de los cabezales toriesféricos en m³
- $A_{cilindro sin tapas}$, es la superficie de la parte cilíndrica (las paredes del tanque) en m²



- $t_{cilindro}$, es el espesor de las paredes cilíndricas en m
- r , es el radio del tanque en m
- D , es el diámetro de tanque en m

Substituyendo:

$$P_{cabezas} = 2 \cdot \left\{ \left[\frac{2}{3} \cdot \pi \cdot \left(\frac{2,37}{2} + 9 \cdot 10^{-3} \right)^3 - \left(\frac{2,37}{2} \right)^3 \right] m^3 \cdot 7980 \frac{Kg}{m^3} \right\}$$

$$= 1276,99 \text{ Kg}$$

$$P_{cilindro} = \pi \cdot 2,37 \text{ m} \cdot 4,75 \text{ m} \cdot 9 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot 7980 \frac{Kg}{m^3} = 2540,02 \text{ Kg}$$

De forma que el peso del tanque vacío será:

$$P_{vacío} = 1276,99 \text{ Kg} + 2540,02 \text{ Kg} = 3817,01 \text{ Kg}$$

Ahora ya se puede calcular el peso del tanque operativo, teniendo en cuenta el volumen de líquido contenido en el tanque y su densidad.

$$P_{operativo} = 3817,01 \text{ Kg} + 21 \text{ m}^3 \cdot \frac{1165,58 \text{ Kg}}{m^3} =$$

$$28294,19 \text{ Kg} \quad (\text{Ecuación 11.2.3.20})$$

11.2.3.7. Agitador

El objetivo de agitar en el reactor R-401 es evitar la formación de gradientes de temperatura, teniendo una mezcla lo más homogénea posible y que se asemeje al



máximo a una mezcla perfecta, para que la temperatura sea uniforme y el reactor isotermo.

A pesar de todo, la agitación de la reacción de neutralización es considerablemente complicada: la mayoría de compuestos interviniéntes son muy corrosivos y además, la viscosidad de la mezcla es elevada. Lo ideal, sería poder forzar la agitación con una inyección por tubos, o algún montaje parecido. El problema radica en que al haber una cantidad de quilos tan considerable, sobretodo en el caso del caudal de recirculación, y la elevada viscosidad de la mezcla, se cree que este sistema no sería suficientemente efectivo. Se estima que un agitador dentro del reactor será más adecuado y proporcionará un comportamiento más parecido al de mezcla ideal. Si bien es cierto que el mantenimiento de éste, probablemente sea más complicado, y se pueda ver dañado por la agresividad de la reacción.

Dentro de los posibles agitadores internos, una buena opción podría ser un agitador de anclas, si lo que se buscara fuera vencer las limitaciones a la transferencia de calor. En este reactor (R-401), esto no es así, ya que la reacción es muy exotérmica, y además la transferencia de calor viene facilitada por el intercambiador que refrigerá la corriente que se recircula. Por esta razón, se opta por un agitador de turbina con doble pala. En la Figura 11.2.3.1. se puede observar un esquema de los diferentes agitadores existentes así como una fotografía de estos.

Es importante tener presente también las trayectorias o líneas de flujo que se darán en función del tipo de agitador escogido, tal y como se puede apreciar en la Figura 11.2.3.2.

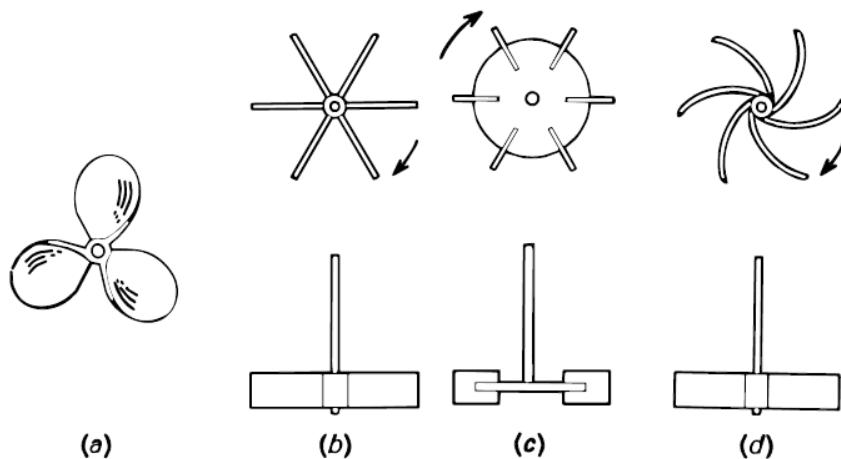


Figura 9.2. Rodetes de mezcla: (a) hélice marina de tres palas; (b) turbina abierta de palas rectas; (c) turbina de disco con palas; (d) turbina abierta de palas curvas.



Figura 11.2.3.1.- Esquema y fotografía de los diferentes tipos de agitadores



Elementos de agitación convencionales en procesos sencillos:

Conventional shaking elements in simple processes: / Eléments d'agitation conventionnels dans des procédés simples:

- | | | |
|--|------------------------------|--------------------------------------|
| a) Hélice marina. | a) Marine helix. | a) Hélice marine. |
| b) Turbina de paletas de flujo radial. | b) Radial flow vane turbine. | b) Turbine à palettes à flux radial. |
| c) Turbina de paletas de flujo axial. | c) Axial flow vane turbine. | c) Turbine à palettes à flux axial. |
| d) Discos Cowles. | d) Cowles discs. | d) Disques Cowles. |



Líneas esquemáticas de flujo según el elemento de agitación seleccionado.

Diagrammatic flow lines according to the shaker element selected. / Lignes schématiques de flux selon l'élément d'agitation sélectionné.

Figura 11.2.3.2.- Líneas de flujo en función del tipo de agitador escogido

■ DIMENSIONES DEL AGITADOR:

Como se ha dicho, el agitador será de tipo turbina. Además, como el agitador estará centrado en el medio del reactor, se decide instalar cuatro bafles (Figura 11.2.3.3.), dos por cada turbina, para evitar la formación de vórtices (Figura 11.2.3.4.), el cual dificultaría vastamente la operación del reactor. En la Figura 11.2.3.5., se puede observar un esquema de este sistema de agitación y de los parámetros principales que lo definen.

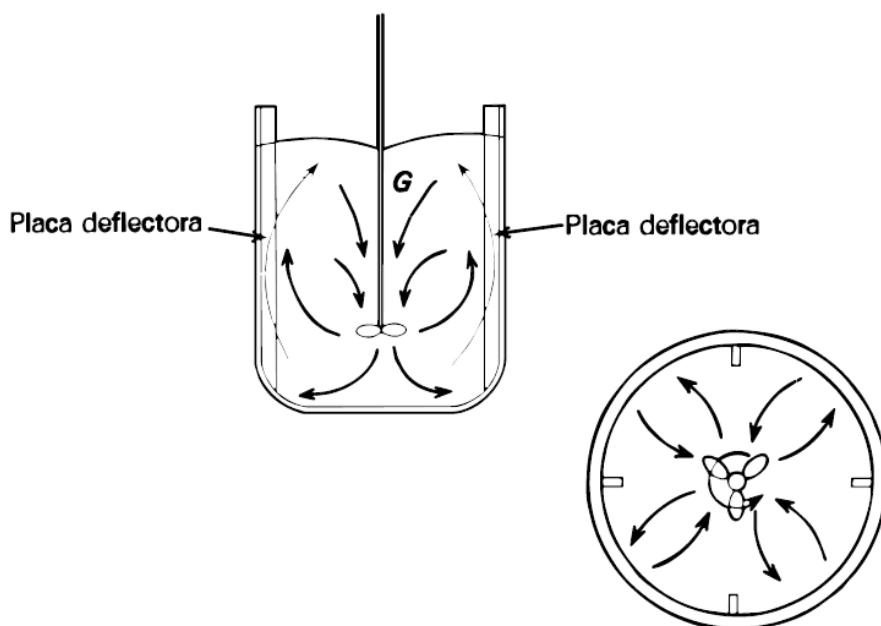


Figura 11.2.3.3.- Esquema de bafles o placas deflectoras

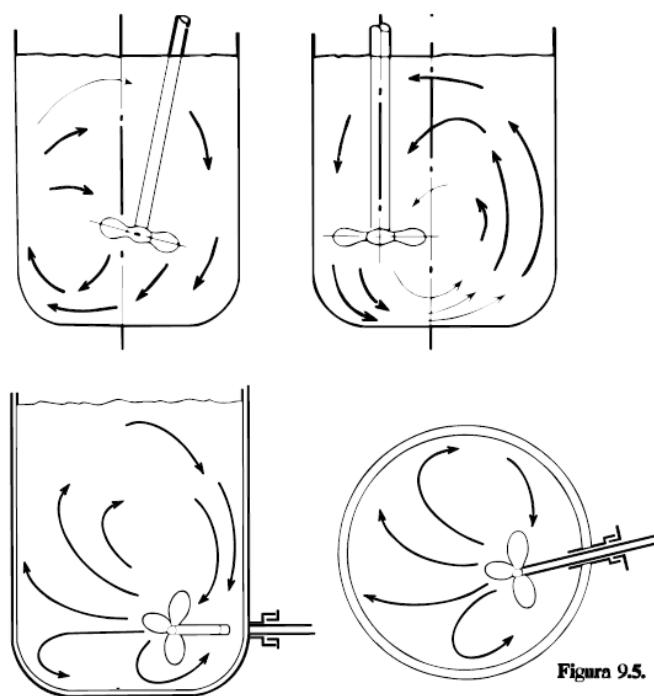


Figura 11.2.3.4.- Esquema de la formación de vórtices

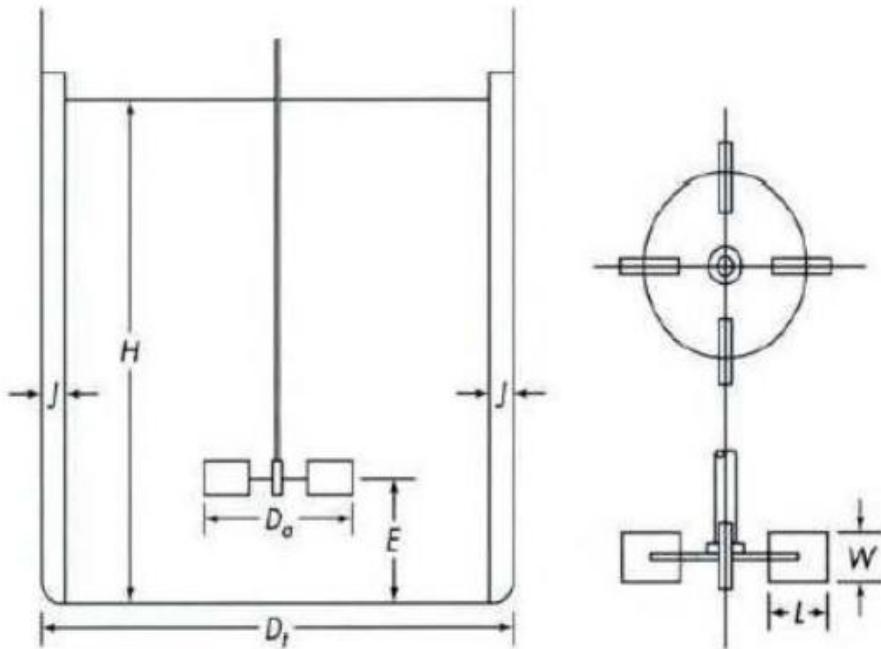


Figura 11.2.3.5.- Esquema de un agitador de turbina

Los parámetros que se observan en la Figura 112.3.5., según (Robert H. Perry, 2008), se pueden calcular con las siguientes correlaciones:

$$D_a = \frac{1}{3} \cdot D_t \quad (\text{Ecuación 11.2.3.21})$$

$$j = \frac{1}{12} \cdot D_t \quad (\text{Ecuación 11.2.3.22})$$

$$E = \frac{1}{3} \cdot D_t \quad (\text{Ecuación 11.2.3.23})$$



$$W = \frac{1}{5} \cdot D_a \quad (\text{Ecuación 11.2.3.24})$$

$$L = \frac{1}{4} \cdot D_a \quad (\text{Ecuación 11.2.3.25})$$

Dónde:

- D_a , es la diámetro del agitador en m
- D_t , es el diámetro interno del reactor en m
- j , es la amplitud de cada bafle en m
- E , es la distancia entre el fondo del reactor y las turbinas en m
- W , es la amplitud de la turbina en m
- L , es la longitud de la turbina en m

Teniendo en cuenta que el diámetro interno del reactor es de 1,75 metros, se encuentran los factores que definen el sistema de agitación substituyendo en las ecuaciones justamente explicadas:

$$D_a = \frac{1}{3} \cdot 1,75 \text{ m} = 0,58 \text{ m}$$

$$j = \frac{1}{12} \cdot 1,75 \text{ m} = 0,146 \text{ m}$$

$$E = \frac{1}{3} \cdot 1,75 \text{ m} = 0,58 \text{ m}$$

$$W = \frac{1}{5} \cdot 0,58 \text{ m} = 0,116 \text{ m}$$



$$L = \frac{1}{4} \cdot 0,58 \text{ m} = 0,145 \text{ m}$$

- POTENCIA DEL AGITADOR:

La potencia del agitador se puede determinar a partir del número de potencia (N_p), tal y como indica la ecuación 11.2.3.26.

$$P = N_p \cdot D_a^5 \cdot N^3 \cdot \rho \quad (\text{Ecuación 11.2.3.26})$$

Dónde:

- P , es la potencia que requiere el agitador en W
- N_p , es el número de potencia
- D_a , es el diámetro del agitador en m
- N , es el número de revoluciones del agitador en rps
- ρ , es la densidad del fluido en kg/m³

En la misma bibliografía (Robert H. Perry, 2008), se propone calcular el número de potencia gráficamente. Primero se debe calcular el número de Reynolds con la ecuación 11.2.3.27.

$$N_{Re} = \frac{D_a \cdot N \cdot \rho}{\mu} \quad (\text{Ecuación 11.2.3.27})$$

Dónde:

- N_{Re} , es el numero adimensional de Reynolds
- D_a , es el diámetro del agitador en m
- N , es el número de revoluciones del agitador en rps



- ρ , es la densidad del fluido en kg/m^3
- μ , es la viscosidad de la mezcla en $\text{Kg/m}\cdot\text{s}$

Se supone un valor de una 3 rps, ya que bibliográficamente se ha contrastado como uno de los valores típicos (Robert H. Perry, 2008). Substituyendo en la ecuación anterior:

$$N_{Re} = \frac{0,58 \cdot 3 \cdot 1165,58}{1,49} = 1361,15$$

Seguidamente, localizando este valor en el eje de abscisas, e interpolando al de ordenadas, tal y como se muestra en la Figura 11.2.3.6., se encuentra el valor del número de potencia, que es 4,25.

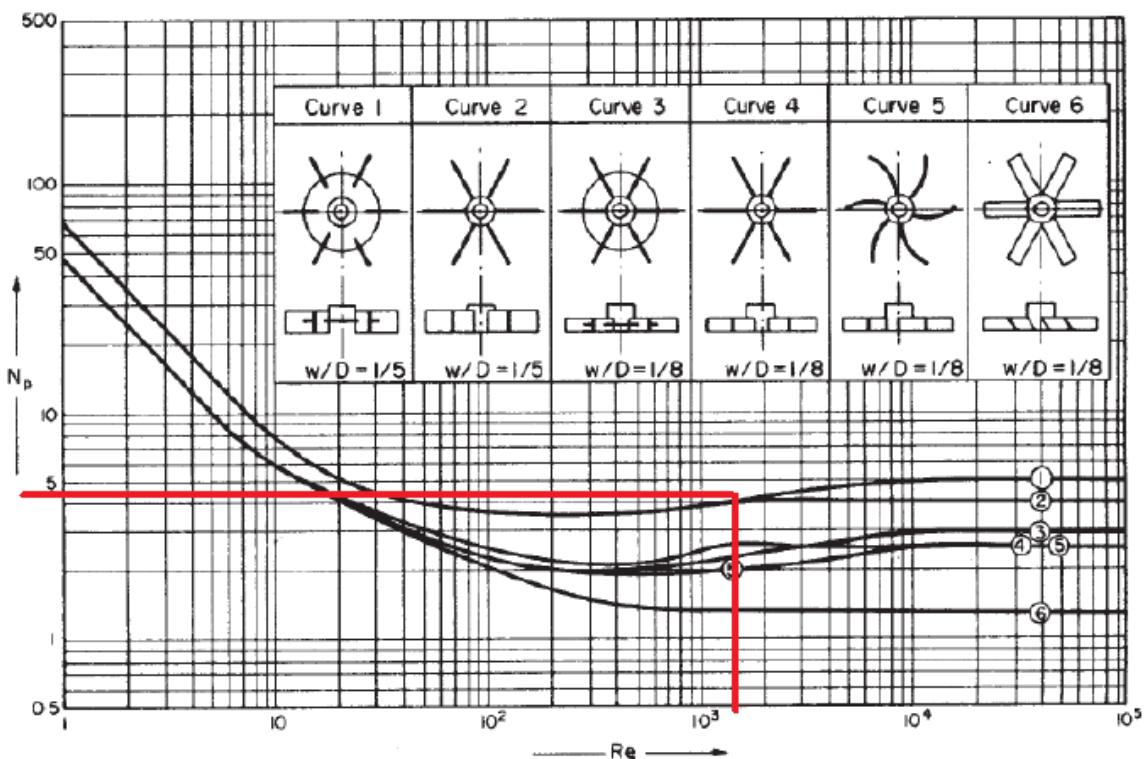


Figura 11.2.3.6.- Número de potencia en función del Reynolds



Finalmente, ya se puede calcular la potencia requerida por el agitador substituyendo en la ecuación 11.2.3.26.

$$P = 4,25 \cdot 0,58^5 \cdot 3^3 \cdot 1165,58 = 8778,79 \text{ W} = 8,78 \text{ kW}$$

■ COMPROBACIÓN :

Una vez obtenida la potencia de agitación, se decide comprobar si los valores obtenidos son correctos, y están dentro de los rangos típicos. Para ello, es necesario calcular la relación entre la potencia requerida y el volumen del reactor, tal y como indica la ecuación 11.2.3.28., y contrastar con los propuestos en la Tabla 11.2.3.8.

$$\frac{P}{V_{reactor}} = \frac{8,78}{21} = 0,42 \frac{\text{kW}}{\text{m}^3} \quad (\text{Ecuación 11.2.3.28})$$

Tabla 11.2.3.8.- Requerimientos de potencia para diferentes agitaciones

Table 10.14. Power requirements — baffled agitated tanks

Agitation	Applications	Power, kW/m ³
Mild	Blending, mixing	0.04–0.10
	Homogeneous reactions	0.01–0.03
Medium	Heat transfer	0.03–1.0
	Liquid-liquid mixing	1.0–1.5
Severe	Slurry suspension	1.5–2.0
	Gas absorption,	1.5–2.0
	Emulsions	1.5–2.0
Violent	Fine slurry suspension	>2.0

Se observa como el valor obtenido, 0,42 kW/m³, corresponde a una agitación media, indicada para la transferencia de calor, o para la mezcla de líquidos, como es el caso.



■ TIEMPO DE MEZCLA:

En cuanto el tiempo de mezcla, se ha encontrado una correlación en la bibliografía para estimarlo. En concreto, la correlación está indicada para un agitador de turbina de seis palas (Robert H. Perry, 2008).

$$t_{mezcla} = 5 \cdot \frac{\pi \cdot D_t \cdot H}{4} \cdot \left(\frac{1}{0,92 \cdot N \cdot D_a^2 \cdot D_t} \right) \quad (\text{Ecuación 11.2.3.28})$$

Dónde:

- t mezcla, es el tiempo de mezcla estimado en segundos
- D_t , es el diámetro del tanque en metros
- H , es la altura de líquido en metros
- D_a , es el diámetro del agitador en metros
- N , es la velocidad del agitador en rps

Substituyendo:

$$t_{mezcla} = 5 \cdot \frac{\pi \cdot 1,75 \cdot 7,5}{4} \cdot \left(\frac{1}{0,92 \cdot 3 \cdot 0,58^2 \cdot 1,75} \right) = 31,72 \text{ segundos}$$

11.2.3.8. Aislante

El reactor se encuentra a una temperatura interior de 160 °C, por esta razón se decide poner una manta aislante. Como en la mayoría de los equipos de la planta, se opta por dimensionar esta manta aislante con el programa Calorcol. El material de la manta será lana de roca; y al tratarse de una temperatura considerable, se opta por la de mayor tamaño, 140 kg/m³. En la Figura 11.2.3.7., se muestra una captura de pantalla de los datos introducidos en el programa de estimación. Se obtiene una manta con un espesor de tres pulgadas y media (3,5 "), o lo que es lo mismo, 88,9 mm.



Cálculo de Espesor Óptimo - Pérdida de Calor - Equipos [1]

CALORCOL
· LANA MINERAL DE ROCA ·

Mantas Aislantes de 140 kg/m³

Datos de Entrada

Temperatura Interior:	180	°C
Temperatura Superficie Aislamiento:	40	°C
Temperatura Ambiente:	25	°C
Velocidad del Aire:	0	m/s
Código Material :	6	Emisividad:
Superficie Exterior Aislamiento:	0.1	Consultar
Superficie Desnuda:	0.3	Consultar

Calcular **Cancelar** **Graficar**

CALORCOL S.A Calle 46 N° 71 - 121 Copacabana (Antioquia - Colombia)
PBX: (574) 274 41 49 FAX: (574) 274 56 92 Email: info@calorcol.com Web: http://www.calorcol.com

Figura 11.2.3.7.- Captura de pantalla del soporte para la estimación de aislante

Calorcol. Los resultados corresponden al equipo R-401



11.3. COLUMNAS

11.3.1. COLUMNAS DE DESTILACIÓN (C-201/C-202)

11.3.1.1. Balance de materia

La mezcla de reacción que procedente del reactor R-201 se divide de dos corrientes de igual caudal. Cada una de estas corrientes se introducen en las columnas de destilación C-201 y C-202.

Estas columnas tienen como finalidad la separación del amoníaco en exceso, el tert-butanol, parte del agua de la mezcla y la ciclohexanona no reaccionada con el objetivo de purificar la oxima y recircular estos reactivos al reactor R-201. Esta separación se lleva a cabo gracias a las diferentes volatilidades que presentan cada uno de los compuestos que forman la mezcla.

Las condiciones de presión utilizadas en esta primera destilación son de 50KPa según las especificaciones de la patente US 7.449.600 B2 sobre la purificación de la oxima. Trabajar a una presión tan baja permite operar a condiciones menos extremas de temperatura, evitando así los posibles problemas de operación que esto podría ocasionar.

A continuación se explica el proceso seguido para realizar diseño de las columnas. Al tratarse de dos columnas exactamente iguales, con el mismo caudal a tratar y la misma finalidad, se explica únicamente el proceso de cálculo de la columna C-201. La columna C-202 se ha diseñado de forma análoga por lo que se obtienen los mismos resultados.

Para realizar el diseño de la columna C-201 se ha utilizado el programa Aspen HYSYS. En primer lugar, se ha realizado un diseño con el método Short Cut indicando las fracciones molares de los componentes clave de entrada y salida de la columna y una relación de reflujo aproximada. Gracias a este método se han obtenido unos valores aproximados en lo que se refiere a temperaturas de trabajo, número de



etapas, etapa de alimentación y la relación de reflujo mínima, facilitando así llevar a cabo un diseño más riguroso.

Así pues, en un diseño más riguroso de la columna se han ido probando diferentes configuraciones, tomando como variables el número de platos de la columna, el caudal de destilado y la relación de reflujo. Por cada configuración estudiada se ha realizado la simulación y, en los casos viables (cuando el programa converge), el software da como resultado la composición y propiedades de las corrientes de salida. De este modo se ha ido iterando hasta obtener aquella configuración de la columna con la que se consigue la separación deseada de los componentes.

La configuración de la columna que conlleva una óptima separación consta de 6 platos, introduciendo el alimento por la cuarta etapa. En la figura -.- muestra una captura del programa HYSYS de la columna a diseñar.

La mezcla de reacción que procedente del reactor R-201 se divide de dos corrientes de igual caudal. Cada una de estas corrientes se introducen en las columnas de destilación C-201 y C-202.

Estas columnas tienen como finalidad la separación del amoníaco en exceso, el tert-butanol, parte del agua de la mezcla y la ciclohexanona no reaccionada con el objetivo de purificar la oxima y recircular estos reactivos al reactor R-201. Esta separación se lleva a cabo gracias a las diferentes volatilidades que presentan cada uno de los compuestos que forman la mezcla.

Las condiciones de presión utilizadas en esta primera destilación son de 50KPa según las especificaciones de la patente US 7.449.600 B2 sobre la purificación de la oxima. Trabajar a una presión tan baja permite operar a condiciones menos extremas de temperatura, evitando así los posibles problemas de operación que esto podría ocasionar.



A continuación se explica el proceso seguido para realizar diseño de las columnas. Al tratarse de dos columnas exactamente iguales, con el mismo caudal a tratar y la misma finalidad, se explica únicamente el proceso de cálculo de la columna C-201. La columna C-202 se ha diseñado de forma análoga por lo que se obtienen los mismos resultados.

Para realizar el diseño de la columna C-201 se ha utilizado el programa Aspen HYSYS. En primer lugar, se ha realizado un diseño con el método Short Cut indicando las fracciones molares de los componentes clave de entrada y salida de la columna y una relación de reflujo aproximada. Gracias a este método se han obtenido unos valores aproximados en lo que se refiere a temperaturas de trabajo, número de etapas, etapa de alimentación y la relación de reflujo mínima, facilitando así llevar a cabo un diseño más riguroso.

Así pues, en un diseño más riguroso de la columna se han ido probando diferentes configuraciones, tomando como variables el número de platos de la columna, el caudal de destilado y la relación de reflujo. Por cada configuración estudiada se ha realizado la simulación y, en los casos viables (cuando el programa converge), el software da como resultado la composición y propiedades de las corrientes de salida. De este modo se ha ido iterando hasta obtener aquella configuración de la columna con la que se consigue la separación deseada de los componentes.

La configuración de la columna que conlleva una óptima separación consta de 6 platos, introduciendo el alimento por la cuarta etapa. En la figura 11.3.1.1. muestra una captura del programa HYSYS de la columna a diseñar.

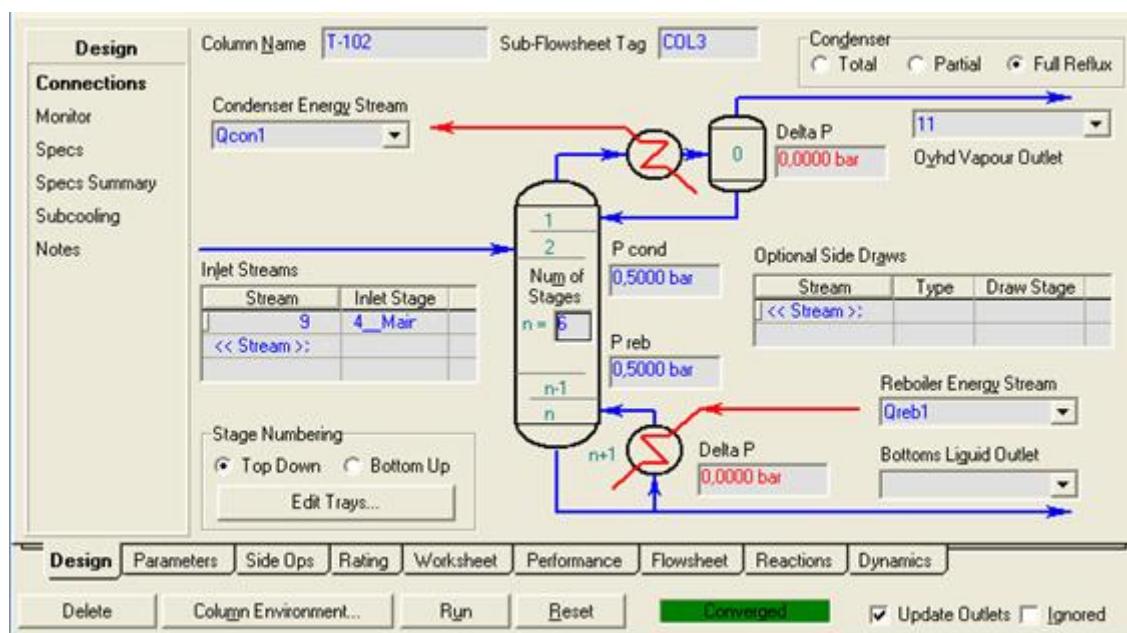


Figura 11.3.1.1.- Captura de pantalla. Simulación Aspen Hysys.

Cabe mencionar que el condensador de la columna es un condensador de reflujo total. De esta manera, la corriente de destilado 11 está en fase gas.

Los parámetros operacionales de la columna obtenidos en la simulación se recogen en la tabla 11.3.1.1.

Tabla 11.3.1.1.- Características operacionales. Columnas C-201/C-202.

Número de platos	6
Etapa alimentación	4
Temperatura reboiler (ºC)	83,82
Temperatura condensador (ºC)	63,91
Presión de operación (KPa)	50
Relación de reflujo	2,5

Por otro lado, en la tabla 11.3.1.2. se incluyen las especificaciones de cada uno de las corrientes de la columna. Para facilitar la comprensión, la figura 11.3.1.2. muestra una captura del ambiente de simulación.



Tabla 11.3.1.2.- Balance de materia. Columnas C-201/C-202.

Corriente	9	11	7
Temperatura (ºC)	82	63,91	83,82
Presión (bar)	3	0,5	0,5
Fracción de vapor	0	1	0
Caudal molar (Kmol/h)	412,32	262,47	149,85
Caudal másico (kg/h)	16630,76	11238,42	5392,34
Caudal volumétrico (m ³ /h)	20,80	14711,47	5,90
Densidad (kg/m ³)	799,39	0,763	914,20
FRACCIÓN MÁSICA			
NH ₃	0,024	0,036	0
H ₂ O	0,264	0,196	0,406
TB	0,515	0,762	0
CH	0,004	0,005	2e-4
CHO	0,193	0,000	0,594
CAUDAL MOLAR (kmol/h)			
NH ₃	23,723	23,723	0
H ₂ O	244,104	122,56	121,54
TB	115,595	115,595	0
CH	0,604	0,593	0,011
CHO	28,294	0	28,294

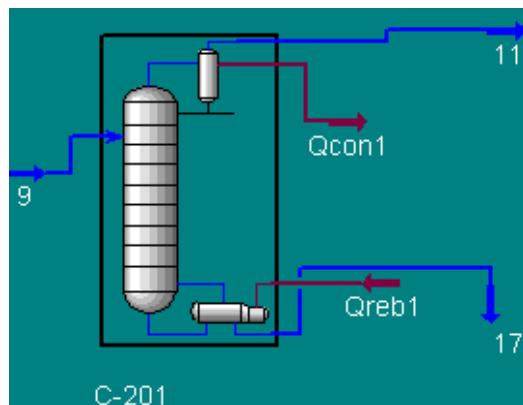


Figura 11.3.1.2.- Ambiente de simulación. Columnas C-201/C-202.

Cabe comentar que el tert-butanol forma un azeótropo con el agua (con una composición del 12,1% en peso), al igual que sucede con la ciclohexanona. No obstante, las características operacionales de la columna permiten obtener casi toda la mezcla azeotrópica en el destilado, por lo que el residuo contiene únicamente una pequeña ciclohexanona. Por otro lado, todo el amoníaco sale por las cabezas de la columna gracias a su elevada volatilidad.

De este modo, la corriente 7, que es la línea principal del proceso, está compuesta por la oxima disuelta en agua y una pequeña cantidad de ciclohexanona. No obstante, esta corriente requiere de otras operaciones de separación para llegar a la elevada pureza necesaria en la entrada al área 3 (Beckmann).

11.3.4.2. Diseño mecánico

SELECCIÓN DEL TIPO DE COLUMNA

El primer paso para el diseño y dimensionamiento ha sido la selección del tipo de columna (relleno o platos perforados). Para llevar a cabo esta elección se han tenido en cuenta los criterios y consideraciones mostrados en la bibliografía (Wankat, 202). En el caso de las columnas de platos, algunas de sus ventajas y características son:



- Fácil fabricación.
- Eficiencia buena en condiciones de diseño. Sin embargo, el rechazo, que es el funcionamiento al operar a menos del flujo de diseño, es relativamente malo.
- Eficiencia baja a flujos de gas menores al 60% aproximadamente.
- Diámetros de columna grandes (>0.76 m).
- Versatilidad y de fácil modificación.
- Presiones superiores a la atmosférica.
- Posible ensuciamiento (las columnas de platos son más fáciles de limpiar).
- Esfuerzos térmicos o mecánicos (que pueden provocar la rotura del relleno).

Por otro lado, las condiciones favorables para la selección una columna empacada:

- Diámetros menores a 0.76. En las columnas empacadas mayores el líquido podría tender a canalizarse. En muchos casos, las columnas de platos de gran diámetro son menos costosas.
- Menor caída de presión por lo que son útiles en fraccionamientos al vacío.
- Líquidos que forman espuma (debido a que en columnas de relleno la agitación es menor).
- Medios corrosivos.

En este caso, la columna C-201 trabaja a una presión de 50KPa. Según las especificaciones anteriores, al tener condiciones de baja presión interesa trabajar con una columna empacada. Además, otro factor para la elección de este tipo de columnas ha sido el hecho de trabajar con amoníaco, compuesto corrosivo.

SELECCIÓN DEL TIPO DE RELLENO

Una vez decidido que se empleará una columna empacada el siguiente a considerar es la selección del tipo de relleno.



El objetivo del empaque es proporcionar un contacto íntimo entre el vapor y el líquido y, en consecuencia, tener una superficie mayor para la transferencia de materia. Al mismo tiempo, el empaque debe permitir el vaciado fácil del líquido y producir una baja caída de presión en el flujo del gas.

Se puede escoger fundamentalmente entre dos tipos de rellenos: los uniformes (que se depositan con cuidado en el interior de la columna) y los aleatorios (se dejan caer al azar dentro de la columna).

Los primeros (rejas, mallas, rellenos ordenados...) se usan para velocidades de gas elevadas donde se necesita una pérdida de presión baja (por ejemplo en las torres de enfriamiento) debido a su estructura abierta. Proporcionan una buena eficacia aún para flujos de líquido bajos. En la figura 11.3.1.3. se observan diferentes ejemplos de este tipo de relleno:



Figura 11.3.1.3.- Columnas de destilación: Rellenos ordenados.

Por otro lado, los rellenos al azar son los más comunes. Este tipo de relleno ofrece un mayor coeficiente de transferencia de materia a cambio de mayores pérdidas de carga. Algunos ejemplos se incluyen en la figura 11.3.1.4.:

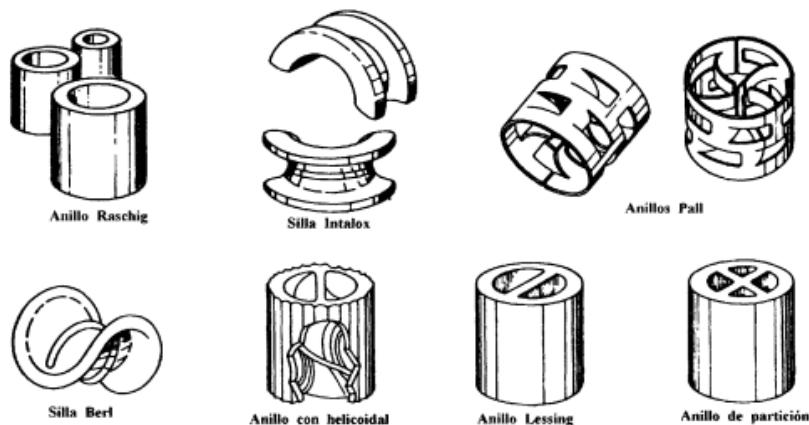


Figura 11.3.1.4.- Columnas de destilación: Rellenos aleatorios.

Para construir estos rellenos se utilizan diversos materiales: cerámica, metales, plásticos y carbono. Los anillos de metal y plástico son más eficaces que los de cerámica puesto que sus paredes pueden ser más finas. La elección del material dependerá de la naturaleza del fluido y la temperatura de operación: el empaquetado cerámico es útil para líquidos corrosivos pero no para disoluciones fuertemente alcalinas. El plástico es atacado por algunos disolventes orgánicos y sólo debe usarse cuando no se sobrepasan temperaturas moderadas. Tanto el relleno metálico como especialmente el cerámico se pueden romper fácilmente.

En el caso de la columna C-201 se ha decidido utilizar un relleno aleatorio, utilizando anillos Ballast de metal de 2 pulgadas. En la figura 11.3.1.5. se observa la forma de este tipo de relleno:



Figura 11.3.1.5.- Columnas de destilación:Ballast ring.



DIMENSIONAMIENTO DE LA COLUMNA

El dimensionamiento de la columna se ha llevado a cabo gracias a la herramienta Tray Sizing del programa Aspen HYSYS. Los resultados obtenidos se incluyen en la tabla 11.3.1.3.

Tabla 11.3.1.3.- Dimensionamiento. Columnas C-201/C-202.

Diámetro (m)	1,9
Altura (m)	3,7
HETP (m)	0,614
Presión de operación (bar)	0,5
ΔP por sección (KPa/m)	0,315
ΔP total (bar)	9,476e-003

Como se puede observar la caída de presión en la columna es muy pequeña, por ello se ha considerado que la columna opera de manera isobárica.

Cálculo del espesor de la columna

El cálculo del espesor necesario de la pared se ha realizado empleando el código ASME (*American Society of Mechanical Engineers*), considerando la columna como un cilindro.

$$t = \frac{P \cdot D_i}{2 \cdot S \cdot E - 1,2 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad (\text{ec. 11.3.1.1.})$$

Los parámetros de la ecuación anterior corresponden a:

t es el espesor de la pared en mm.

P es la presión de diseño en $lb/pulg^2$ (psi) es la máxima presión de trabajo permitida (MAWP), que se calcula como la mayor de:



$$P = P_T \cdot (1 + 0,1) \text{ o } P = P_T + 15 \text{ psi} = P_T + 1 \text{ atm} (\text{ec. 11.3.1.2.})$$

Siendo P_T la presión absoluta de trabajo en el equipo.

D_i es el diámetro interior de la columna. Se considera como este diámetro el obtenido con el método ShortCut para el dimensionamiento de la columna.

E es el factor de soldadura. Se trata de un factor adimensional que toma un valor entre 0-1. Una soldadura representa una discontinuidad la zona de soldadura se considera debilitada. Para corregir esta debilitación se ha de tener cuenta este parámetro, en este caso se ha considerado una soldadura doble con un porcentaje de radiografía parcial por lo que $E=0,85$.

S es el factor de estrés. Este factor varía en función del material de construcción escogido y de la temperatura de operación del equipo. En este caso, la columna C-201 está en contacto con el amoníaco que entra en el alimento. El amoníaco es altamente corrosivo con materiales como el zinc, el aluminio, el cobre o sus aleaciones. Para la elección del material se han estudiado las tablas de corrosión *CHEMICAL RESISTANCE GUIDE (Harrington)* observando que los materiales compatibles son los aceros inoxidables 304L y 316L. De estos dos se ha elegido como material de construcción el más económico: Acero inoxidable 304L (AISI-304L). Este metal es una variante de bajo contenido en carbono del acero inoxidable 304, que tiene una composición del 18% de cromo y 8% en níquel.

Por otro lado, a temperatura de diseño se considera como un 10% superior a la que se llega en el interior de la columna, por ello, en el caso de la columna C-201 esta temperatura es de 92,2°C (198F).

En la figura 11.3.1.6. se incluyen los valores del factor de estrés para diversos tipos de acero a diferentes temperaturas.



Specification		Maximum Allowable Stress, ksi (Multiply by 1000 to Obtain psi), for Metal Temp., °F, Not Exceeding									
Number	Grade	-20 to 100	200	300	400	500	600	650	700	750	800
SA-240	304	18,8	17,8	16,6	16,2	15,9	15,9	15,9	15,9	15,5	15,2
SA-240	304L	15,7	15,7	15,3	14,7	14,4	14	13,7	13,5	13,3	13
SA-240	316	18,8	18,8	18,4	18,1	18,0	17,0	16,7	16,3	16,1	15,9
SA-240	316L	15,7	15,7	15,7	15,5	14,4	13,5	13,2	12,9	12,6	12,4

Figura 11.3.1.6.- Factor de estrés (S).

En este caso el factor de estrés considerado es de 15700 psi.

C_1 es el sobreespesor de corrosión (en $mm/año$). Se trata de un margen de sobreespesor para compensar la posible corrosión que produzcan los productos químicos que están en contacto con el equipo. En la práctica se considera el espesor por corrosión perdido previsto en 10 años teniendo en cuenta que se pierden aproximadamente se pierden 0,1 mm/año de material debido a la corrosión. Si consideramos 20 años de operación de la planta el espesor perdido C_1 será de 2mm.

C_2 es la tolerancia de fabricación. Se trata de la diferencia entre el grosor que se pide al fabricante y la realidad, ya que la pieza no será fabricada a la perfección. En este caso se ha considerado que este valor se puede obviar ya que es poco representativo.

Así pues, todos los datos utilizados para el cálculo del espesor se recogen en la tabla 11.3.1.4.



Tabla 11.3.1.4. Cálculo del espesor. C-201/C-202.

Diámetro (m)	Espesor (mm)
P (psi)	15,73
Dint (mm)	1900
E	0,85
S (psi)	15700
C1 (mm)	2

Por lo tanto, el espesor de la pared cilíndrica obtenido, redondeado al alza es:

$$t = 3,12 \text{ mm} \approx 4 \text{ mm}$$

Este valor ha de ser superior al espesor mínimo para asegurar la rigidez del equipo. En la tabla 11.3.1.5. se incluyen los valores mínimos de espesor en función del diámetro del cilindro [Coulson and Richardson, 2002].

Tabla 11.3.1.5. Espesor mínimo cilindro.

Diámetro (m)	Espesor (mm)
0 - 1	5
1 - 2	7
2 - 3	9
3 - 3,5	12



En este caso el valor calculado es menor al mínimo, ya que el diámetro de la columna es de 1,9 metros. Por ello, el espesor de la pared del cilindro deberá ser de 7 mm.

Cálculo del espesor del cabezal toriesférico

El cabezal elegido ha sido el conocido como fondo de Klopper, que tiene la forma que se observa en la figura 11.3.1.7.

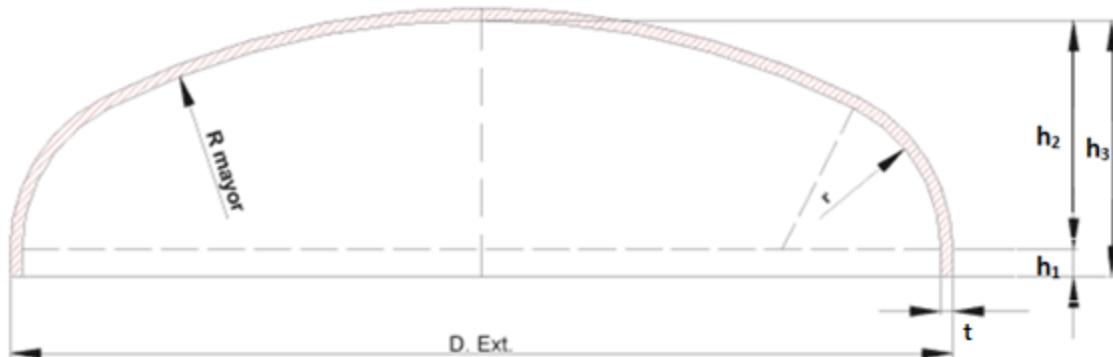


Figura 11.3.1.7.- Cabezal de Klopper o Toriesférico.

Este tipo de cabezales es de uso habitual y cuenta con dos radios (cabezal toriesférico), el radio mayor (R) y el radio r. Como se trata de un cabezal decimal:

$$R = D_i \text{ (ec. 11.3.1.3.)}$$

$$r = 0,1 \cdot D_i \text{ (ec. 11.3.1.4.)}$$

El grosor para este tipo de cabezal se calcula con la ecuación siguiente:

$$t = \frac{P \cdot D_i \cdot M}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2 \text{ (ec. 11.3.1.5.)}$$

M es un factor que es función de D_i/r (diámetro interior/radio pequeño). Como el cabezal se considera como toriesférico decimal este parámetro D_i/r tiene un valor igual a 10. El parámetro M está tabulado y tiene un valor de 1,54.



En este caso la tolerancia de fabricación (C_2), se debe tener en cuenta ya que debido al proceso de fabricación la pieza no será perfecta. Este tipo de piezas se fabrican a partir de una placa metálica del grosor deseado a la que se le aplica una fuerza para producir la curvatura, es por ello que el grosor no será uniforme. El parámetro C_2 ha sido considerado como un 10% del grosor resultante.

$$C_2 = 0,1 \cdot t \text{ (ec. 11.3.1.6.)}$$

Los demás parámetros de la ecuación 11.3.1.5. son los mismos que se han aplicado en el caso del diseño del cilindro. De este modo se ha determinado el espesor del cabezal:

$$t = 3,99 \text{ mm} \approx 4 \text{ mm}$$

Por otro lado, para llevar a cabo el diseño completo también se han de determinar los valores de las alturas h_1 , h_2 y h_3 .

$$h_1 = 3,5 \cdot t \text{ (ec. 11.3.1.7.)}$$

$$h_2 = 0,1935 \cdot D_{ext} - 0,455 \cdot t \text{ (ec. 11.3.1.8.)}$$

$$h_3 = h_1 + h_2 \text{ (ec. 11.3.1.9.)}$$

En cuanto al volumen de la pieza, éste se puede determinar gracias a la siguiente ecuación:

$$V = 0,08089 \cdot D_{int}^3 \text{ (ec. 11.3.1.10).}$$

Así pues, en la tabla 11.3.1.6. se incluyen los parámetros de diseño del fondo de la columnas C-201/C-202.



Tabla 11.3.1.6. Parámetros de diseño cabezal. C-201/C-202.

t (mm)	4
Dint (mm)	1900
Dext (mm)	1908
R (mm)	1900
r (mm)	190
h₁ (mm)	14
h₂ (mm)	367,38
h₃ (mm)	381,38
V (m³)	0,555

Cálculo del espesor del fondo de la columna

Para determinar el espesor del fondo en primer lugar es necesario determinar la presión ejercida en esta zona de la columna. Esta presión vendrá dada por la de diseño y la presión que ejerce la columna de líquido en el fondo del equipo ($\Delta P = \rho \cdot g \cdot h$). La ecuación 11.3.1.11. permite calcular este parámetro.

$$P = [(\rho \cdot g \cdot h) + P_{dis}] \text{ (ec. 11.3.1.11.)}$$

Así pues, en el caso de la columna C-201, la presión calculada en el fondo es de 19,93 psi, aproximadamente 1,37 atm. Con esta nueva presión se ha calculado el espesor para un cabezal tóriesférico del mismo modo que en el caso del cabezal, obteniendo como resultado:

$$t = 4,46 \text{ mm} \approx 5 \text{ mm}$$

En la tabla 11.3.1.6. se incluyen los resultados obtenidos.



Tabla 11.3.1.6. Parámetros de diseño fondo. C-201/C-202.

t (mm)	5
D_{int} (mm)	1900
D_{ext} (mm)	1910
R (mm)	1900
r (mm)	950
h₁ (mm)	17,5
h₂ (mm)	367,17
h₃ (mm)	384,81
V (m³)	0,555

Cálculo del peso de la columna vacía

El peso total de la columna vacía es la suma de las 3 piezas estudiadas anteriormente, por ello se puede calcular como:

$$\text{Peso total} = \text{peso cilindro} + \text{peso cabezal} + \text{peso fondo} \quad (\text{ec. 11.3.1.12.})$$

Para determinar el peso total se conoce que la densidad (ρ) del material utilizado (acero inoxidable 304L) a 25°C es de 8030 kg/m³ de acuerdo con los datos que proporciona el fabricante AK Steel. Con este valor y el volumen del acero requerido para cada una de las piezas se determina el peso de cada parte:

$$\text{Peso}_{\text{lateral cilíndrico}} = V_{\text{pared cilíndrica}} \cdot \rho \quad (\text{ec. 11.3.1.13.})$$

$$V_{\text{pared cilíndrica}} = \pi/4 \cdot (D_{\text{ext}}^2 - D_{\text{int}}^2) \cdot h \quad (\text{ec. 11.3.1.14.})$$

$$\text{Peso}_{\text{cabezal y fondo}} = V_{\text{material}} \cdot \rho \quad (\text{ec. 11.3.1.15.})$$



$$V_{pared\ toriesférica} = 0,08089 \cdot (D_{ext}^3 - D_{int}^3) \quad (ec. \ 11.3.1.16.)$$

En la tabla 11.3.1.7. se incluyen los resultados obtenidos en cuanto al peso y volumen del equipo.

Tabla 11.3.1.7. Determinación del peso del equipo. C-201/C-202.

Pieza	Volumen de material (m ³)	Peso (Kg)
Cilindro	0,155	1246
Cabezal	0,007	56,5
Fondo	0,008	70,7
Peso total (kg)		1373,2

Cálculo del peso de la columna llena

Por otro lado, también se ha realizado el cálculo el peso de la columna llena de agua y llena del líquido en operación. Para ello en primer lugar se ha determinado el volumen total de la columna, teniendo en cuenta el volumen de todas las piezas que la forman. Este volumen se puede calcular como:

$$Volumen\ total = volumen\ cilindro + volumen\ cabezal + volumen\ fondo$$

$$V_{cilindro} = \pi/4 \cdot D_{int}^2 \cdot L \quad (ec. \ 11.3.1.17.)$$

$$V_{cabezal\ y\ fondo} = 0,08089 \cdot D_{int}^3 \quad (ec. \ 11.3.1.18.)$$

De esta manera se determina que:

$$V_{total} = 10,5 + 0,55 + 0,55 = 11,60 \ m^3$$

Si se considera todo el volumen de la columna ocupado por un fluido, el peso total de éste se puede determinar como:

$$Peso\ de\ líquido = V_{total} \cdot \rho \quad (ec. \ 11.3.1.19.)$$



En este caso se ha realizado el estudio para dos fluidos, agua y el fluido en operación, que tienen una densidad (ρ) de 1000kg/m^3 y $798,73\text{kg/m}^3$ respectivamente. Con estos valores se ha calculado el peso total de la columna como:

$$Peso_{columna\ llena} = Peso_{columna\ vacía} + Peso_{de\ líquido}$$

Los resultados de este estudio se incluyen en la tabla 11.3.1.8.

Tabla 11.3.1.8. Determinación del peso del equipo lleno. C-201/C-202.

Líquido	$V_{total}\ (\text{m}^3)$	$\rho\ (\text{kg/m}^3)$	Peso líquido (kg)	Peso columna llena (kg)
Agua		1000	11600,21	12973,44
Fluido operación	11,6	798,73	9265,44	10632,66

Aislamiento térmico

La columna trabaja a elevadas temperaturas. Para evitar pérdidas de calor y llevar a cabo una buena operación, la columna debe estar aislada térmicamente. La temperatura de diseño se considera como un 10% superior a la que se llega en el interior de la columna, por ello, en el caso de la columna C-201 esta temperatura es de 92,2°C.

Para realizar el cálculo del aislamiento se ha utilizado el programa Insulán. Se trata de un software para cálculo de aislamiento de tuberías y equipos con productos de lana mineral de roca STONEWOOL de **CALORCOL S.A.** En la figura 11.3.1.8. se observa una captura de pantalla del programa una vez introducidos los parámetros de operación.



Cálculo de Espesor Óptimo - Pérdida de Calor - Equipos [1]

CALORCOL
· LANA MINERAL DE ROCA ·

Mantas Aislantes de 100 kg/m³

Datos de Entrada

Temperatura Interior:	92.2	°C
Temperatura Superficie Aislamiento:	40	°C
Temperatura Ambiente:	25	°C
Velocidad del Aire:	0	km/h
Superficie Exterior Aislamiento:	6	Emisividad: 0.1
Superficie Desnuda:	2	Emisividad: 0.3

CALORCOL S.A Calle 46 N° 71 - 121 Copacabana (Antioquia - Colombia)
PBX: (574) 274 41 49 FAX: (574) 274 56 92 Email: info@calorcol.com Web: <http://www.calorcol.com>

Figura 11.3.1.8. Aislamiento térmico. C-201/C-202.

La temperatura en la superficie aislamiento se ha considerado de 40°C y la temperatura ambiente como 25°C. Respecto a la velocidad de aire se ha considerado de 0m/s ya que los equipos están situados en el interior de un edificio.

En cuanto a los materiales, la superficie interior (equipo) es de acero inoxidable y la superficie desnuda exterior se ha considerado de aluminio (chapa metálica de 0,6 mm). Introduciendo estos parámetros el software nos recomienda utilizar una manta de 24,5 mm de grosor (1 pulgada).



Diseño mecánico

En conclusión, los detalles del diseño mecánico de este equipo se incluyen en la tabla 11.3.1.8.

Tabla 11.3.1.8. Diseño C-201 / C-202.

DISEÑO MECÁNICO	
Material	AISI 304L
Presión de diseño (bar)	1,50
Temperatura de diseño (ºC)	92,2
DIMENSIONES	
Diámetro interior (m)	1,9
Diámetro exterior (m)	1,91
Altura cilindro (m)	3,7
Altura cabezal (m)	0,38
Altura fondo (m)	0,39
Altura total (m)	4,47
Volumen cilindro (m3)	10,491
Volumen cabezal (m3)	0,555
Volumen fondo (m3)	0,555
Volumen total (m3)	11,60
ESPESORES	
Espesor cilindro (mm)	7
Espesor cabezal (mm)	4
Espesor fondo (mm)	5
PESOS	
Peso cilindro (kg)	1245,99
Peso cabezal (kg)	56,51
Peso fondo (Kg)	70,72
Peso equipo vacío (kg)	1373,22
Peso en operación (kg)	10638,66
Peso con agua (kg)	12973,44



11.3.2. COLUMNAS DE EXTRACCIÓN (C-203)

11.3.2.1. Introducción

La extracción líquida, llamada algunas veces extracción con disolventes, es la separación de los componentes de una solución líquida (solutos) por contacto con otro líquido insoluble. Si las sustancias que componen la solución original se distribuyen de manera distinta entre las dos fases líquidas, se puede lograr cierto grado de separación.

En este caso, la columna de extracción C-203 es alimentada por la parte superior se alimenta la corriente 19 (salida por colas de las columnas de destilación C-201 y C-202), que contiene una gran cantidad de agua con la ciclohexanona oxima disuelta. Por otro lado, por la parte inferior se introduce la corriente orgánica 23, que consiste en una mezcla formada principalmente por tolueno recirculado y una pequeña fracción de tolueno nuevo para compensar las pérdidas.

Así pues, oxima (sólido) presenta una mayor solubilidad en el disolvente orgánico (tolueno) que en la fase acuosa. Por este motivo, al poner en contacto ambas fases se lleva a cabo la extracción, obteniendo una corriente orgánica que contiene la mayor parte de la oxima y trazas de agua. El producto de la operación rico en disolvente se llama extracto; el agua residual de donde se separa la oxima es el refinado.

11.3.2.2. Balance de materia

Gracias al programa Aspen HYSYS se ha simulado la operación de la columna de extracción C-203. La extracción se ha llevado a cabo a una temperatura de 72°C y en condiciones de presión atmosféricas de acuerdo con la patente US 7.449.600 B2. Esta patente propone llevar a cabo una extracción con agitación. No obstante, debido a la complejidad de este tipo de equipo y a su mayor necesidad de mantenimiento, se ha decidido trabajar con una columna sin agitación. Así pues, la relación molar oxima-tolueno propuesta por la patente es de 1, sin embargo, al trabajar en condiciones



diferentes, se ha realizado la simulación de la operación, iterando parámetros clave como lo son la cantidad de agente extractor y el número de platos de la columna. En este caso, los mejores resultados para la extracción de la oxima se han obtenido con una columna de 10 etapas y un caudal de tolueno de 17,54 m³/h. En la figura 11.3.2.1. se observa una captura de la columna de extracción:

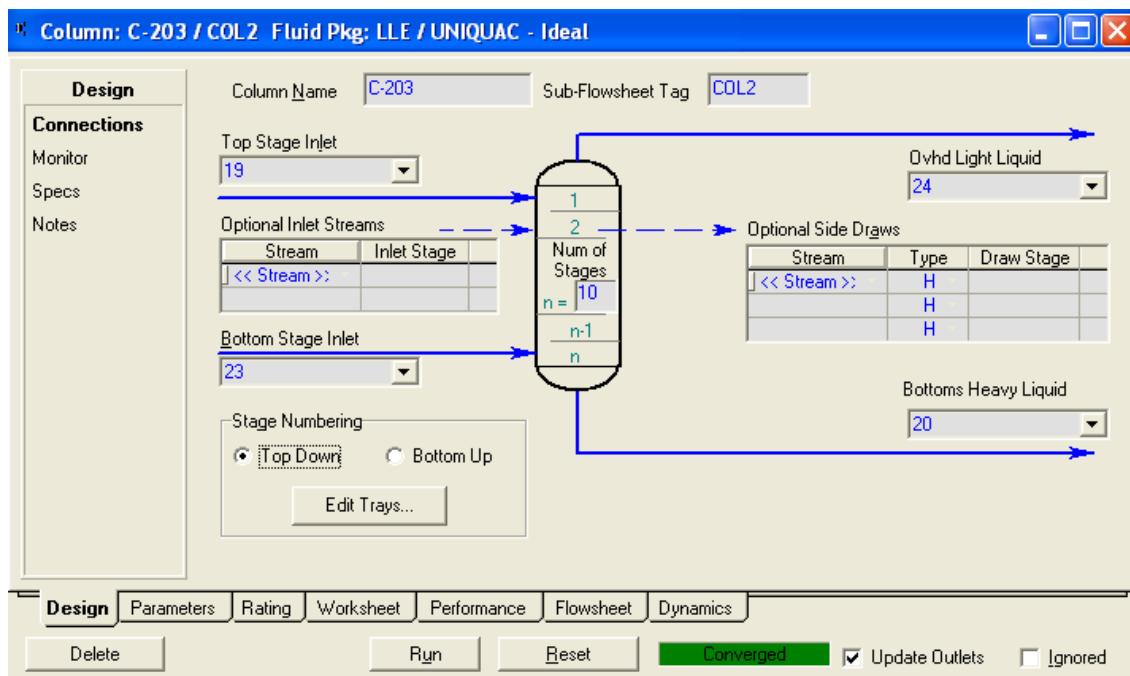


Figura 11.3.2.1. Resolución de la simulación. C-203.

Una vez realizadas estas especificaciones, el programa procede a realizar las iteraciones para obtener la resolución del sistema. Tal como se muestra en la figura 11.3.2.1. el sistema ya ha convergido. Así pues, las corrientes de salida de la columna de extracción ya se encuentran especificadas. Las propiedades, así como las composiciones de las corrientes de entrada y salida obtenidas, se pueden observar en la tabla 11.3.2.1. Para facilitar la comprensión de la correspondencia de las corrientes, la figura 11.3.2.2. incluye una captura del ambiente de simulación de la columna.

Tabla 11.3.2.1. Resolución de la simulación. C-203.

11. MANUAL DE CÁLCULO

CaprolacTeam, Caprolactam Industries



Corriente	19	23	20	24
Temperatura (°C)	72	72	72	72
Presión (bar)	1,013	1,013	1,013	1,013
Fracción de vapor	0	0	0	0
Caudal molar (Kmol/h)	299,69	162,78	212,17	250,3
Caudal másico (kg/h)	10784,58	14998,57	3826,3	21956,85
Caudal volumétrico (m ³ /h)	11,66	18,30	3,94	26,16
Densidad (kg/m ³)	924,97	819,71	970,81	839,39
FRACCIÓN MÁSICA				
H ₂ O	0,406	0	0,9986	0,025
TB	0	0	0	0
CH	2,07E-04	8,72E-06	0	1,07E-04
CHO	0,594	0	3,10E-06	0,292
TL	0	0,9999	0	0,683
CAUDAL MOLAR (Kmol/h)				
H ₂ O	243,07	1,25E-06	212,11	30,96
TB	0	0	0	0
CH	0,02	0	5,30E-05	0,02
CHO	56,59	0	0	56,59
TL	0	162,78	5,51E-02	162,72

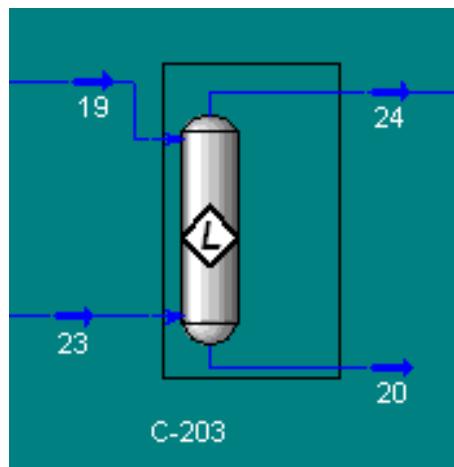


Figura 11.3.2.2. Ambiente de simulación. C-203.

El refinado acuoso (20) es una corriente residual de la planta que tiene como destino la zona de tratamiento de residuos (A-900). Por otro lado, la corriente 20 será posteriormente tratada mediante destilación en las columnas C-204 y C-205 para recuperar el tolueno y obtener la oxima con una elevada pureza.

11.3.2.2. Diseño mecánico

Selección del tipo de columna

Este tipo de columnas, al igual que las de destilación, pueden ser de relleno o de platos perforados. Además, también existen columnas con agitación, de manera que el contacto entre las 2 fases está más favorecido.

Por otro lado, este proceso también se puede llevar a cabo con mezcladores – decantadores conectados en serie. Cada mezclador – decantador se considera como una etapa de equilibrio, por ello, este método se emplea cuando se requiere un número bajo de etapas de contacto. En este caso el número de etapas obtenido con HYSYS es de 10, por lo que no se plantea esta opción sino que se ha considerado una estructura en columna.



La configuración elegida para el diseño de este equipo ha sido la de una columna sin agitación ya que las columnas agitadas llevan asociados elevados costes de mantenimiento.

Teniendo en cuenta estas consideraciones, se ha decidido diseñar la columna de extracción como una columna de platos perforados. En la figura 11.3.2.2. se puede observar una representación esquemática de este tipo de equipos.

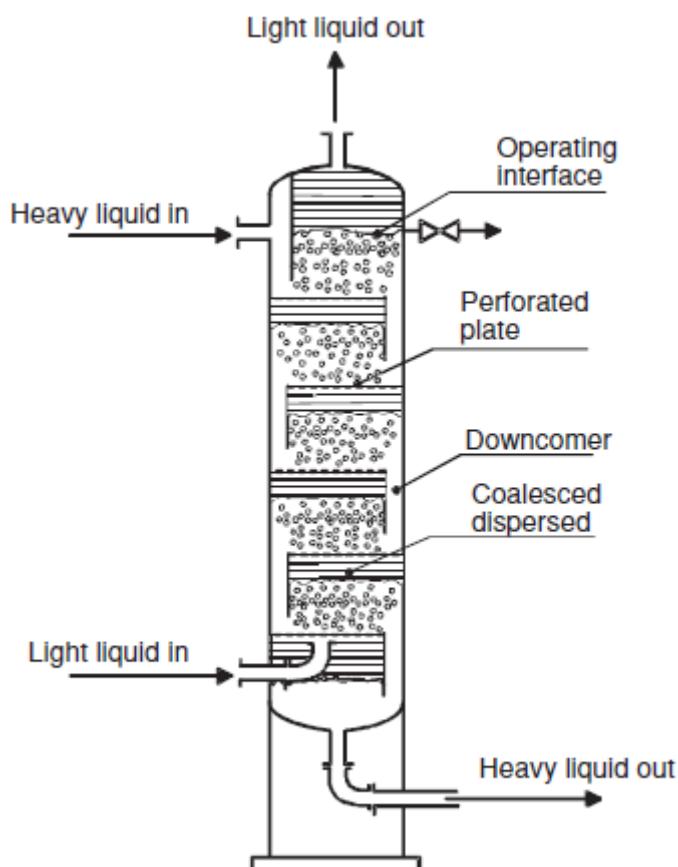


Figura 11.3.2.2. Esquema de una columna de platos extracción.

Tal y como muestra la figura, el líquido ligero (tolueno) en este caso es la fase dispersa. El caudal de disolvente fluye hacia arriba a través de los agujeros de cada plato y gracias a eso se dispersa en forma de gotas que se elevan a través de la fase continua. La fase continua fluye horizontalmente a través de los platos y pasa al plato inferior a través del downcomer.



Los platos sirven para eliminar (o al menos reducir) la recirculación vertical de la fase continua. La transferencia de materia se aumenta al repetir la coalescencia y redispersión en gotas en cada una de las etapas de la columna.

Dimensionamiento

Para determinar el diámetro de la columna en primer lugar se ha calculado el área necesaria de la sección (A) según la ecuación:

$$v = \frac{Q}{A} \quad (\text{ec. 11.3.2.1.})$$

La velocidad del líquido (v) en este tipo de equipos suele oscilar entre 10-30 m/h. En este caso se ha considerado un valor intermedio (20 m/h) para llevar a cabo el dimensionamiento de la columna. Por otro lado, el parámetro Q es el caudal volumétrico que entra en la columna de extracción, en este caso la suma de los dos corrientes de entrada, $29,96 \text{ m}^3/\text{h}$. De este modo, se ha determinado que el área de la columna ha de ser de $1,5 \text{ m}^2$.

Por otro lado, el diámetro de la columna se puede determinar gracias a la ecuación siguiente, ya que la sección de la columna es circular.

$$A = \frac{\pi \cdot D^2}{4} \quad (\text{ec. 11.3.2.2.})$$

En este caso, el diámetro obtenido es de 1,4 m.

En lo que respecta a la altura del equipo, el espaciado entre platos ha de ser suficiente para cumplir los siguientes requisitos:

Debe permitir la formación de gotas de la fase dispersa antes de fusionarse y llegar al siguiente plato.

La velocidad del flujo transversal de la fase continua no debe causar un efecto excesivo en la fase dispersa.



Se debe de poder entrar a la columna a través de agujeros (handholes o manholes) en los lados para inspecciones y limpiezas.

Vistas estas consideraciones, en general este tipo de columnas han de tener una altura por etapa de entre 45 y 60 cm (Robert H. Perry, 2008). En el caso del diseño de la columna C-203 se ha decidido utilizar una distancia entre platos de 60 cm. La columna consta de 10 etapas, por lo que la altura total es de 6 m.

Distribuidor de líquido

En este tipo de columnas, no es necesario utilizar un distribuidor de líquido, ya que los platos perforados producen una redistribución del líquido.

Diseño del plato perforado

En una columna de platos, el área del plato se estima como el 90% del área de la columna y, en consecuencia, el área restante es el espacio que ocupa el downcomer:

$$A_{plato} = 0,9 \cdot A_{sección} \quad (ec. 11.3.2.3.)$$

$$A_{downcomer} = A_{sección} - A_{plato} \quad (ec. 11.3.2.3.)$$

De esta manera se determina que las áreas del plato y el downcomer son de 1,35 m² y 0,15 m² respectivamente.

Por otro lado, el diámetro de poro de los platos suele estar entre 1,27 – 1,82 cm, distribuidos de forma cuadrada o triangular. Se ha considerado en este caso un valor intermedio de 1,6 cm. No obstante, en este tipo de equipos el diámetro de poro no tiene un efecto significativo en la transferencia de materia.

Finalmente, también cabe comentar que la zona perforada del plato es normalmente del 15 -25% de la sección de la columna. En este caso se ha considerado del 25% del plato.



Tabla 11.3.2.2. Parámetros de diseño. C-203.

DISEÑO MECÁNICO	
Material	AISI 304L
Presión de diseño (bar)	2
Temperatura de diseño (°C)	79,2
Tipo de columna	Platos perforados
DIMENSIONES	
Diámetro interior (m)	1,38
Diámetro exterior (m)	1,40
Altura cilindro (m)	6
Altura cabezal (m)	0,28
Altura fondo (m)	0,28
Altura total (m)	6,56
Volumen cilindro (m ³)	9
Volumen cabezal (m ³)	0,22
Volumen fondo (m ³)	0,22
Volumen total (m ³)	9,44
ESPESORES	
Espesor cilindro (mm)	7
Espesor cabezal (mm)	5
Espesor fondo (mm)	6
PESOS	
Peso cilindro (kg)	1470,69
Peso cabezal (kg)	37,44
Peso fondo (Kg)	44,99
Peso equipo vacío (kg)	1553,12
Peso en operación (kg)	9664,48
Peso con agua (kg)	10977,53
AISLAMIENTO TÉRMICO	
Lana de roca 100 kg/m ³ (mm)	12,70



11.3.3. Columnas de destilación C-204 / C-205

11.3.1.1. Balance de materia

Las columnas de destilación C-204 y C-205 tienen como finalidad la separación de la oxima de la corriente extracto de la columna C-203 (24), que contiene principalmente la oxima disuelta en tolueno y una fracción de agua.

Estas dos columnas trabajan en paralelo, por ello presentan las mismas condiciones de operación. A continuación, a modo de ejemplo de cálculo, se explica el procedimiento seguido para el cálculo de la columna C-204.

Esta columna trabaja en condiciones de muy baja presión, de esta manera se evita trabajar a temperaturas más elevadas que puedan dañar el producto o suponer un riesgo en la operación.

Para la simulación de esta columna se ha empleado el programa Aspen HYSYS. De este modo, se ha realizado una iteración con los parámetros operacionales (altura de la columna y de la alimentación, reflujo y caudal de destilado) hasta obtener la pureza de oxima requerida para la siguiente parte del proceso (R-301), que es de aproximadamente el 100% en peso.

En la figura 11.3.3.1. se presenta una captura del diseño de la columna:

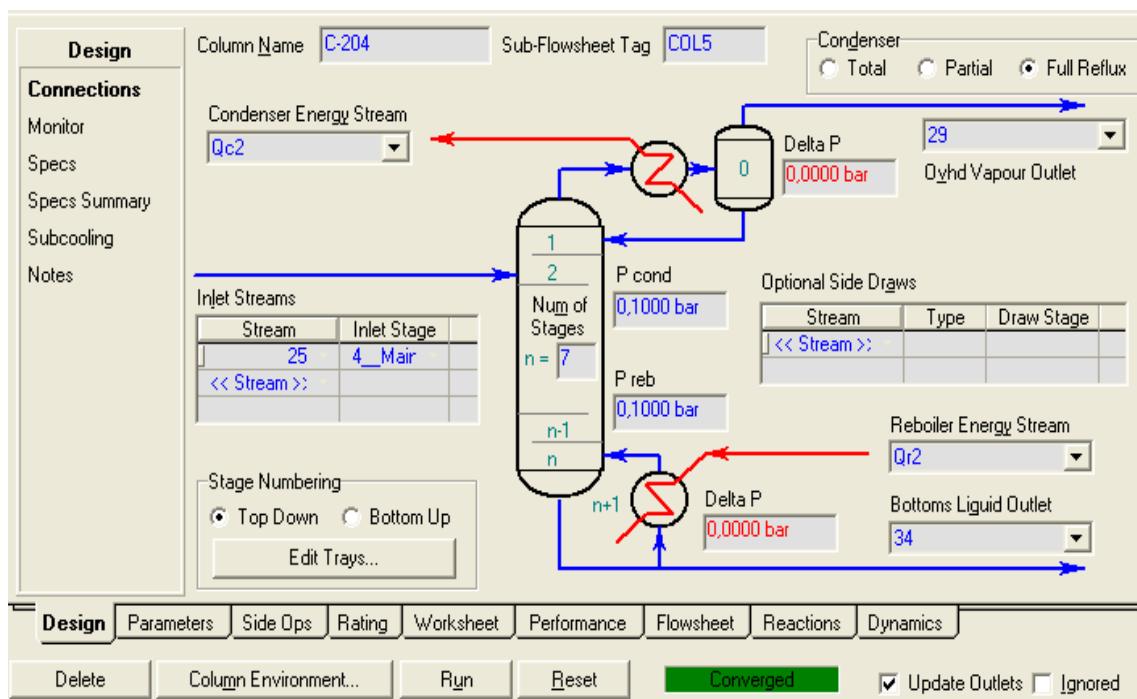


Figura 11.3.3.1. Resolución. C-204/C-205.

Los resultados operativos obtenidos en la simulación con el programa Aspen HYSYS se resumen en la tabla 11.3.3.1.

Tabla 11.3.3.1. Resolución. C-204/C-205.

Número de platos	7
Etapa alimentación	4
Temperatura reboiler (ºC)	99
Temperatura condensador (ºC)	11
Presión de operación (bar)	0,02
Relación de reflujo	0,5

Así pues, Con una columna de estas características se obtienen los resultados de separación que se incluyen en la tabla 11.3.3.2.



Tabla 11.3.3.2. Resultados de la simulación. C-204/C-205

Corriente	25	29	34
Temperatura (ºC)	72	41,43	135,24
Presión (bar)	1,013	0,1	0,1
Fracción de vapor	0	0	1
Caudal molar (Kmol/h)	125,17	96,87	28,29
Caudal másico (kg/h)	10979,71	7777,92	3201,78
Caudal volumétrico(m ³ /h)	13,08	25336,89	3,93
Densidad (kg/m ³)	839,28	0,31	815,34
Entalpia (Kcal/h)	-2,30E+06	1,17E+05	-1,55E+06
FRACCIÓN MÁSICA			
H ₂ O	2,54E-02	3,59E-02	0
CH	1,47E-04	1,91E-04	4,13E-05
CHO	0,291	3,32E-08	0,999
TL	0,683	0,964	2,06E-07
CAUDAL MOLAR (kmol/h)			
H ₂ O	15,485	15,485	3,18E-07
CH	1,65E-02	1,52E-02	1,35E-03
CHO	28,294	1,04E-06	28,29
TL	81,369	81,369	5,40E-06



Para la mejor compresión de estas corrientes, la figura 11.3.3.2. incluye una captura del ambiente de simulación:

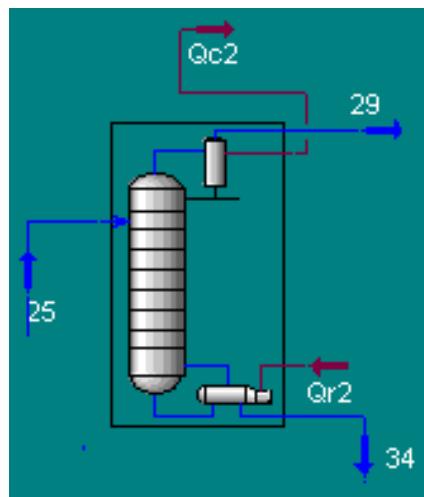


Figura 11.3.3.2. Ambiente e simulación. C-204/C-205.

Como se puede observar, la corriente que sale por cabezas de la columna (29) es principalmente tolueno con una pequeña de los demás compuestos (mayoritariamente agua). Esta corriente entra posteriormente al separador de fases S-202 donde se eliminan los restos de agua y el tolueno se recircula como alimento a la columna de extracción C-203.

Por otro lado, la corriente 34 contiene la oxima con una pureza de aproximadamente el 100%. Esta corriente se mezcla con la corriente de que sale por colas de la destilación C-205 y se alimenta a los reactores R-301, R-302 y R-303 donde se produce la transposición de Beckman.



En cuanto al dimensionamiento de la columna, se ha utilizado la herramienta Tray sizing, obteniendo los resultados de operación que se incluyen en la tabla 11.3.3.3. El tipo de relleno utilizado han sido anillos ballast de metall de 2 pulgadas.

Tabla 11.3.3.3. Resultados tray sizing. C-204/C-205.

Diámetro (m)	1,67
Altura (m)	5,14
HETP (m)	0,733
Presión de operación (bar)	0,1
ΔP por sección (KPa/m)	0,191
ΔP total (bar)	8,517e-003

11.3.1.2. Diseño mecánico

El diseño mecánico de la columna se ha llevado a cabo de igual manera que en el caso de las columnas C-201 y C-202. Los resultados obtenidos se incluyen en la tabla 11.3.3.5.



Tabla 11.3.3.3. Resultados tray sizing. C-204/C-205.

Material	AISI 304L
Presión de diseño (bar)	1,13
Temperatura de diseño (°C)	148,5
Tipo de relleno	Ballast ring 2" de metal
DIMENSIONES	
Diámetro interior (m)	1,67
Diámetro exterior (m)	1,68
Altura cilindro (m)	5,14
Altura cabezal (m)	0,34
Altura fondo (m)	0,34
Altura total (m)	5,82
Volumen cilindro (m³)	11,26
Volumen cabezal (m³)	0,38
Volumen fondo (m³)	0,38
Volumen total (m³)	12
ESPESORES	
Espesor cilindro (mm)	7
Espesor cabezal (mm)	4
Espesor fondo (mm)	5
PESOS	
Peso cilindro (kg)	494,55
Peso cabezal (kg)	43,69
Peso fondo (Kg)	54,67
Peso equipo vacío (kg)	592,91
Peso en operación (kg)	10916,73
Peso con agua (kg)	12605,03
AISLAMIENTO TÉRMICO	
Lana de roca 100 kg/m³ (mm)	38,10



11.3.4. COLUMNA DE STRIPPING (C-401)

11.3.4.1. Introducción

Esta unidad, C-401, se encuentra detrás del reactor de neutralización (R-401). El objetivo de ésta es la desadsorción del amoníaco disuelto en la corriente principal del proceso (corrientes 57 o 58) mediante vapor de agua. Como ya se ha dicho con anterioridad, en la reacción de neutralización, no sólo está presente la cantidad de amoníaco estequiométrica necesaria disuelta en agua, sino que se añade un 10% de exceso con el fin de asegurar la neutralización en caso de que haya un aumento del caudal de ácido sulfúrico o SO_3 . No hacer un “stripping” del amoníaco disuelto, implicaría tener un compuesto que sería una impureza del producto o subproducto del proceso. Además, podría complicar, e incluso hacer no posible, la purificación de ambos.

11.3.4.2. Balance de materia de la columna

El diseño de la columna C-401, se ha hecho mediante el simulador de procesos Hysys, de la misma manera que las columnas anteriores. En este caso, teniendo en cuenta la composición de la corriente de entrada, la cual puede ser observada en Tabla 11.3.4.1., se ha ido modificando el caudal de entrada de vapor de agua, de manera que a la salida de la columna, en la corriente por colas de ésta, la composición de amoníaco fuera cero; de esta manera, el amoníaco es arrastrado por el vapor de agua y sale por la corriente de cabezas.



Tabla 11.3.4.1.- Especificaciones de las corrientes de entrada a C-401.

CORRIENTE 58	%W	W(Kg/h)	ρ (kg/m ³)	Q (m ³ /h)
ε-caprolactama	0,194	6370,90		
(NH ₄) ₂ SO ₄	0,270	8869,24		
(NH ₄)OH	0,014	470,24		
H ₂ O	0,521	17119,00		
Total		32829,37	1176,03	27,92
CORRIENTE 67	%W	W(Kg/h)	ρ (kg/m ³)	Q (m ³ /h)
H ₂ O(g)		1290,41		
Total		1290,41	958,24	53,46

Tabla 11.3.4.2.- Especificaciones de las corrientes de salida a C-401.

CORRIENTE 68	%W	W(Kg/h)	ρ (kg/m ³)	Q (m ³ /h)
ε-caprolactama	0,19	6370,90		
(NH ₄) ₂ SO ₄	0,26	8869,24		
H ₂ O	0,55	18503,48		
Total		33743,61	1570,99	21,48
CORRIENTE 59	%W	W(Kg/h)	ρ (kg/m ³)	Q (m ³ /h)
H ₂ O(g)	0,39	147,68		
	0,61	228,54		
NH ₃ (g)				
Total		376,22	0,6071	619,70



Es importante remarcar que este vapor y amoníaco no se pierden, sino que son recirculados después de ser condensados al reactor T-401, donde se prepara la solución de amoníaco en agua necesaria para neutralizar el ácido sulfúrico.

11.3.4.3. Diseño de la columna y selección del tipo de columna

Como ya se ha dicho, el diseño de la columna se ha hecho con el simulador de procesos Hysys, modificando con este la corriente de vapor de entrada hasta conseguir la composición deseada a la salida. En la Tabla 11.3.4.3., se muestran los resultados obtenidos con el sistema operativo.

Tabla 11.3.4.3.- Condiciones de operación de la columna

Corriente	58	67	68	59
Temperatura (ºC)	74,70	100	101,3	74,23
Presión (bar)	1,013	1,013	1,013	1,013
Fracción de vapor	0	1	0	1
Etapas			9	

Operando en las condiciones indicadas en la Tabla 11.3.4.3., se consiguen los resultados explicados en el apartado anterior. Como se ha visto, el consumo de vapor para eliminar el amoníaco disuelto es considerable, de 1290,41 kg/h; aún así se puede considerar que es una columna eficiente, ya que se consigue el objetivo de desadsorber todo el amoníaco.

Una vez definidas las condiciones de operación de la columna, se ha procedido a dimensionarla con el mismo simulador. Hysys, como ya se ha explicado, posee la utilidad “Tray Sizing”, la cual permite el dimensionamiento deseado. En este caso, también se ha decidido hacer una columna con relleno de anillos Ballast de metal de 2 pulgadas. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 11.3.4.4..



Tabla 11.3.4.4.- Resultados del Tray Sizing para la columna C-401

TRAY SIZING	
SECCIÓN 1	Primera etapa
Diámetro (m)	0,4572
Altura (m)	0,4572
Correlación HETP	Frank
Presión de operación (bar)	1,013
ΔP total (bar)	$6,594 \cdot 10^{-5}$
SECCIÓN 2	De la 2 ^a a la 9 ^a etapa
Diámetro (m)	0,6096
Altura (m)	3,448
Correlación HETP	Frank
Presión de operación (bar)	1,013
ΔP total (bar)	$0,7667 \cdot 10^{-3}$

Como se observa, la columna tiene una geometría peculiar, siendo la etapa número uno empezando por cabezas, diferente al resto. Esta tiene un diámetro inferior, lo cual se justifica por la salida de vapor.

11.3.4.4. Diseño mecánico

El diseño mecánico de la columna de stripping C-401 se ha llevado a cabo siguiendo el mismo protocolo de cálculo que en el caso de las columnas C-201 y C-202. Los resultados obtenidos se incluyen en la Tabla 11.3.4.5. Añadir que en este caso, se ha escogido para la columna como material más idóneo el Acero Inoxidable AISI 316-L,



ya que por ésta circularan amoníaco y sulfato de amonio, compuestos altamente corrosivos. De hecho, la Harrington así lo sugiere, y bibliográficamente también se han encontrado casos industriales en los que cuando interviene alguno de los compuestos nombrados se utiliza dicho material. La densidad del acero inoxidable AISI 316-L, es de 7980 kg/m³. En la Tabla 11.3.4.5. se especifican los parámetros utilizados para calcular el espesor.

Tabla 11.3.4.5.- Parámetros para calcular el espesor

	Sección 1	Sección 2
P (atm)	2	2
Dint (mm)	457,2	609,6
E	0,85	0,85
S (atm)	1068,32	1068,32
C1 (mm)	2	2

Cabe destacar, que el cálculo del espesor se ha hecho también correspondiente al diámetro de cada sección. Es decir, que al haber dos secciones diferenciadas, con diferentes diámetros internos y diferentes alturas, también hay diferentes espesores. En cualquier caso, tanto en la primera sección como en la segunda, el espesor obtenido en las partes cilíndricas al aplicar la ecuación dictaminada por la normativa ASME, es inferior al mínimo.

11.3.4.5. Aislamiento térmico

Igual que en el aislamiento térmico calculado en las columnas anteriores, se ha realizado el cálculo del aislamiento mediante el programa Insulán. El material de la manta será lana de roca 100 kg/m. Se obtiene una manta con un espesor de una pulgada y media (1,5 "), o lo que es lo mismo, 25,4 mm.

11.3.4.6. Especificaciones de la Columna de “stripping” C-401*Tabla 11.3.4.6.- Especificaciones de la columna C-401.*

DISEÑO MECÁNICO		
Material	AISI 316-L	
Presión de diseño (bar)	2,0265	
Temperatura de diseño (ºC)	110	
Tipo de relleno	Ballast ring 2" de metal	
DIMENSIONES		
SECCIÓN	1	2
Diámetro interior sección 1 (m)	0,4572	0,6096
Diámetro exterior (m)	0,4672	0,6196
Altura cilindro (m)	0,4572	3,448
Altura cabezal (m)	0,103	-
Altura fondo (m)	-	0,132
Altura total (m)	4,414	
Volumen cilindro (m3)	0,0751	1,0064
Volumen cabezal (m3)	$7,73 \cdot 10^{-3}$	
Volumen fondo (m3)	-	0,0183
Volumen total (m3)	1,1075	
ESPESORES		
Espesor cilindro (mm)	5	
Espesor cabezal (mm)	4	
Espesor fondo (mm)	4	
PESOS		
Peso cilindro (kg)	26,48+265,63=292,11	
Peso cabezal (kg)	4,14	
Peso fondo (Kg)	7,31	
Peso equipo vacío (kg)	303,56	
Peso en operación (kg)	2043,37	
Peso con agua (kg)	1411,06	
AISLAMIENTO TÉRMICO		
Lana de roca 100 kg/m3 (mm)	25,4	



11.3.5. COLUMNA DE EXTRACCIÓN (C-501)

11.3.5.1. Introducción:

En esta primera etapa de la purificación se lleva a cabo una extracción líquido-líquido con benceno, con el objetivo de separar el crudo de caprolactama del sulfato de amonio que se encuentra disuelto. Para dar a cabo esta operación se utiliza un extractor, en el cuál intervienen cuatro corrientes, dos de entrada y dos de salida.

En primer lugar, la corriente 90, que contiene el crudo de caprolactama y el sulfato de amonio, entra por la parte superior de la columna. Por otra parte, la corriente 103 contiene el benceno recirculado y el que se añade para compensar pérdidas, además de trazas de agua, y entra por la parte inferior de la columna, a contracorriente.

Cuando las dos corrientes líquidas entran en contacto hay una transferencia de materia. Según los equilibrios encontrados en la bibliografía [referencia equilibrios] , el sulfato de amonio es insoluble en el benceno, y se separa completamente del crudo de caprolactama. Al mismo tiempo, el agua y el benceno son insolubles entre sí, hecho que facilita la separación. Por otra parte, la caprolactama se transfiere a la fase orgánica del disolvente, y para que esta transferencia sea posible las necesidades de benceno son elevadas, dado que la caprolactama es bastante soluble en benceno.

Como resultado se tienen dos corrientes de salida del extractor. La corriente 94, el extracto, contiene de mayor a menor proporción, benceno, caprolactama y agua. Y por otra parte, la corriente 93, el refinado, que de mayor a menor proporción contiene agua, sulfato de amonio y benceno.



11.3.5.2. Balance de materia

El procedimiento utilizado para la obtención de las corrientes ha sido el simulador Aspen HYSYS.

En primer lugar, se ha escogido un modelo termodinámico apropiado para la mezcla a separar, para ello se ha escogido el modelo termodinámico líquido-líquido UNIQUAC – Virial, dado que la mezcla a separar contiene compuestos orgánicos con fuerte interacción entre ellos, es decir, es una mezcla líquida no ideal.

En segundo lugar, se han considero los parámetros necesarios para que se lleve a cabo la simulación, que son los siguientes.

- Definición de las corrientes de entrada y salida
- Presión de la parte superior e inferior de la columna
- Temperatura de la parte superior e inferior de la columna
- Número de etapas de equilibrio

A continuación se muestran las especificaciones de las corrientes implicadas obtenidas con el HYSYS.



Tabla 11.3.5.1.- Especificaciones de las corrientes. C-501.

Corriente	90	103	94	93
Temperatura (ºC)	75	75	75	75
Presión (bar)	1,013	1,013	1,013	1,013
Fracción de vapor	0	0	0	0
Caudal molar (kmol/h)	210	896,2	953,8	152,41
Caudal másico (kg/h)	9200	70000	76367	2833
Caudal volumétrico (m ³ /h)	9,15	85,71	91,63	5,56
Densidad (kg/m ³)	1005	816,8	833,4	509,3
FRACCIÓN MÁSICA				
H ₂ O	0,30	0	0,0004	0,9639
CPL	0,69	0	0,0831	0
BZ	0	1,00	0,9165	0,0036
(NH ₄) ₂ SO ₄	0,01	0	0	0,0325
CAUDAL MOLAR (kmol/h)				
H ₂ O	153,2	0,00	1,6956	151,58
CPL	56,08	0,00	56,085	0,00
BZ	0,00	896,17	896,05	0,1314
(NH ₄) ₂ SO ₄	0,6962	0,00	0,00	0,6962

El refinado (93) es una corriente residual de la planta que se envía al área de tratamiento de residuos líquidos y gaseosos. Por otra parte, el extracto (94) se envía a las columnas C-502 y C-503, para proceder a su destilación.



11.3.4.1. Diseño

Este tipo de columnas, al igual que las columnas de destilación, pueden ser de relleno o de platos perforados. Además también existen columnas con agitación, de manera que el contacto entre las dos fases está más favorecido. Gracias a la bibliografía [Coulson and Richardson, 2002] se han encontrado diferentes consideraciones para escoger entre una columna de platos o una de relleno.

Columnas de relleno:

- Situaciones en las que se requieren pocas etapas
- Velocidades elevadas de transferencia de materia
- No se recomiendan cuando se separan suspensiones o líquidos de alta viscosidad
- Relación altura/diámetro grande

Columnas de platos:

- Situaciones en las que se requieren muchas etapas.
- Facilidad en el manejo de los sólidos
- Relación altura/diámetro pequeña

El número de etapas dado por el programa es de 12. Además, la mezcla que hay que separar es muy viscosa porque tiene un contenido alto en caprolactama. Así pues, se ha decidido trabajar con una columna de extracción de platos.

A continuación se muestra una imagen del tipo de columna utilizado:

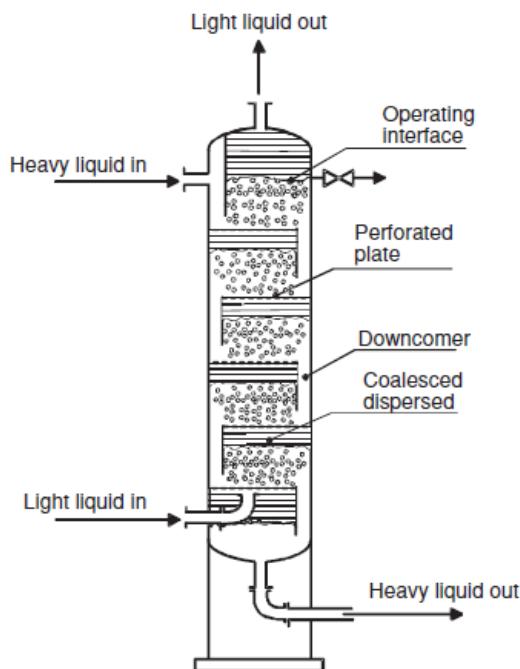


Figura 11.3.5.1. Columna de platos perforados. C-501

Como se ha comentado anteriormente y como se puede observar en la figura, la columna trabaja a contracorriente. Según este esquema, la fase pesada, que contiene el crudo de caprolactama corresponde a la fase continua. Este fase fluye horizontalmente y baja al plato inferior por el “downcomer”, dándose la transferencia de materia. Por otro lado, la fase ligera, que contiene el disolvente benceno, corresponde a la fase dispersa, la cual fluye hacia arriba a través de los agujeros de los platos, dándose una dispersión de ésta en forma de gotitas.

La efectividad de la transferencia de materia, en este caso, se deriva del hecho de que el mezclado de la fase continua está confinado a la región entre los platos, y no se distribuye por toda la torre de etapa a etapa. Además, las gotas de la fase dispersa coalescen y se vuelven a formar en cada plato, destruyendo la tendencia a la formación de gradientes de concentración dentro de las gotas, los cuales persisten en toda la altura de la torre.

Dados los resultados de la simulación del HYSYS y una vez seleccionado el tipo de columna, se han calculado el diámetro y la altura de la torre siguiendo el procedimiento empleado para la columna C-203 (apartado 11.3.2.).



Tabla 11.3.5.2. Diseño columna de extracción C-501

DISEÑO MECÁNICO	
Material	AISI 316L
Presión de diseño (bar)	2,03
Temperatura de diseño (ºC)	95
Tipo de platos	Perforados
DIMENSIONES	
Diámetro interior (m)	2,5
Diámetro exterior (m)	2,518
Altura cilindro (m)	7,2
Altura cabezal (m)	0,508
Altura fondo (m)	0,515
Altura total (m)	8,23
Volumen cilindro (m3)	35,34
Volumen cabezal (m3)	1,264
Volumen fondo (m3)	1,264
Volumen total (m3)	37,88
ESPESORES	
Espesor cilindro (mm)	9
Espesor cabezal (mm)	7
Espesor fondo (mm)	9
PESO	
Peso cilindro (kg)	4076,5
Peso cabezal (kg)	170,4
Peso fondo (kg)	2219,4
Peso equipo vacío (kg)	4465,8
Peso en operación (kg)	34397
Peso con agua (kg)	42346



11.3.6. COLUMNAS DE DESTILACIÓN C-502 y C-503

11.3.6.1. Introducción

La segunda etapa de la purificación de la caprolactama incluye dos columnas de destilación en paralelo, cuya alimentación es idéntica en cada columna, es decir, el 50% del caudal mísico total de la salida de la columna extractiva.

El objetivo de estas columnas es obtener la caprolactama con una pureza mínima del 99,5% en masa, mediante la separación del agua y parte importante del benceno de la caprolactama.

11.3.6.2. Balance de materia

Ambas columnas de destilación se han diseñado con el simulador de procesos Hysys. En primer lugar, se ha hecho una aproximación de la columna mediante la opción “Short Cut Distillation”, y para realizar el diseño detallado se ha utilizado el método riguroso “Distillation Column”, introduciendo algunos de los parámetros calculados a partir del “Short Cut Distillation”.

“Short Cut Distillation”:

Antes que nada, para escoger la opción del “Short Cut Distillation” o la de “Distillaton Column” hay que escoger un modelo termodinámico adecuado que calcule el equilibrio vapor-líquido, teniendo en cuenta la naturaleza de la mezcla de sustancias que compone la corriente a destilar, antes de entrar en el “Simulation Environment” del Hysys, donde se especifican las corrientes y los equipos a diseñar.

Teniendo en cuenta las características de la mezcla a destilar, se ha escogido para la fase líquida el modelo de actividad UNIQUAC, que es un modelo generalmente utilizado para mezclas no ideales; y para la fase gas, la ecuación de estado VIRIAL, la cual se ha considerado idónea para esta mezcla dada la fuerte interacción molecular de la caprolactama con el benceno y el agua.

Por otra parte, se aprecia que el agua y el benceno forman un azeótropo heterogéneo de punto de ebullición mínimo. Esta heterogeneidad implica que se



forman dos fases líquidas inmiscibles. De todas formas, en la corriente de entrada a la destilación la proporción de agua respecto el benceno es muy pequeña, por lo que se puede concluir que el azeótropo heterogéneo existe, pero no supone un impedimento para la separación deseada mediante la destilación.

Respecto la opción “**Short Cut Distillation**” se requieren los siguientes parámetros:

- Definición de la corriente de entrada a la destilación
- Fracción molar del componente ligero en el residuo de la columna
- Fracción molar del componente pesado en el destilado de la columna
- Presión del condensador y del “reboiler”

A partir de esa información el simulador calcula la relación de reflujo mínima para el grado de separación escogido, las etapas de equilibrio necesarias y el plato del alimento adecuado.

“Distillation colum”:

A partir de la información proporcionada por el “Short Cut Distillation” ya se puede diseñar la columna mediante el método riguroso usado por el Hysys. Los parámetros que se requieren son los siguientes:

- Tipo de condensador: total o parcial
- Definir las corrientes de materia y energía
- Número de etapas de equilibrio
- Presión del condensador y del “reboiler”
- Relación de reflujo y caudal de destilado

Como se puede observar en las tablas de volatilidades relativas (Tabla 11.3.6.1.), la diferencia de volatilidades absolutas entre el componente clave ligero, el benceno, y el componente clave pesado, la caprolactama, son muy grandes. Por lo tanto, se justifica el uso de la operación de destilación continua para esta separación de la mezcla.



Tabla 11.3.6.1. Diseño columna de extracción C-502/C-503

Componente	K
H ₂ O	1,742
CPL	0,001394
BZ	2,154

La tabla 11.3.6.2. incluye la composición de las corrientes de entrada y salida de la columna. La corriente 58 es el alimento, 59 corresponde a la salida en el destilado y 67 es el residuo, con una concentración cercana al 100% de caprolactama.

Tabla 11.3.6.2. Resultados de la simulación. C-502/C-503.

Corrientes producto	58	59	67
Temperatura (°C)	90,36	9,06	236
Presión (bar/a)	1,013	0,7599	0,7599
Fracción de vapor	0,892	0	0
Caudal molar (kmol/h)	476,9	448,4	28,55
Caudal másico (kg/h)	38183	35000,6	3183
Caudal volumétrico (m ³ /h)	12695	39,37	3,61
Densidad (kg/m ³)	3,008	889,1	882,1
FRACCIÓN MÁSICA			
H ₂ O	0,0004	0,0002	0,0024
CPL	0,0831	0,0000	0,9976
BZ	0,9165	0,9998	0,0000
CAUDAL MOLAR (kmol/h)			
H ₂ O	0,3884	0,3886	0,4947
CPL	28,051	0,0000	28,051
BZ	448	448	0,000



11.3.6.3. Selección del tipo de columna

En primer lugar hay que decidir qué tipo de columna se seleccionará. En general hay dos tipos de columna, las de platos o las de relleno, y dentro del grupo de las columnas de platos se encuentran las de platos agujereados, las de campanas de borboteo y las de válvulas. En la bibliografía se encuentran los criterios de selección, que se resumen a continuación.

Consideraciones para una columna de relleno:

- Separación de mezclas sensibles a la temperatura, con riesgo a descomposición y/o polimerización.
- Separación de mezcla corrosiva.
- La mezcla a separar es clara, no ensucia, se encuentra libre de sólidos.
- La mezcla a separar tiende a formar espuma, la cual se aplasta más fácilmente en una columna de relleno.
- Necesidad de operación al vacío.
- Pequeñas caídas de presión.
- Diámetros inferiores a 700 mm.
- Relación de reflujo elevada.

Consideraciones para una columna de platos:

- Flujo elevado de líquido y vapor
- Mayor versatilidad
- Existencia de mala distribución del líquido y del gas
- Facilidad para el manejo de partículas sólidas en la columna
- Relación de reflujo baja.

Dadas estas consideraciones se ha optado por operar en columnas de platos, el diámetro estimado (Ver tabla diseño general de las columnas) supera la recomendación de los 700 mm, además de que los caudales de líquido y vapor son altos.

Por otra parte, las columnas C-502 y C-503 operación a vacío, concretamente a una presión de 0,7599 bares (0,75 atm), esa es la presión necesaria para que haya una



separación óptima de los componentes, una correcta operación de la columna y que sus dimensiones sean las adecuadas para este proceso.

Además, en la operación de destilación con columnas de platos el contacto líquido-gas se puede clasificar según el tipo de flujo en los dispositivos internos de contacto:

- Platos de flujo cruzado
- Platos de flujo a contracorriente

El tipo de flujo en plato de flujo cruzado es el más usado ampliamente en todos los diseños, debido a ventajas de eficiencia de transferencia de materia y un intervalo más amplio de operación. Por lo tanto, en este caso se selecciona la columna de platos a flujo cruzado.

11.3.6.4. Diseño mecánico

Para el diseño detallado de los platos de las columnas de platos se ha utilizado la herramienta “Tray Sizing” del simulador Hysys. En resumen, se han escogido platos perforados para las dos columnas de destilación, ya que con éstos se estimaba un diámetro de la columna menor que si se utilizaban los otros tipos de platos.

En la tabla 11.3.6.3. se presentan las características de las dos columnas de destilación.



Tabla 11.3.6.3. Diseño funcional de las columnas C-502 y C-503.

DISEÑO GENERAL	
Diámetro (m)	2,75
Nº platos	7
Plato entrada alimento	4
Distancia entre platos (m)	0,61
Relación reflujo (L/D)	0,8
Presión operación (bar/a)	0,76
Inundación (%)	66,07
ΔP total (bar)	0,037
DISEÑO PLATOS	
Área activa (m ²)	5,553
Área total agujeros (m ²)	0,5576
"Total Weir lenght" (mm)	1416
"Weir Height " (mm)	50,8
"Max Weir Load" (m ³ /h·m)	31,74

Hasta ahora se ha descrito el diseño general de las columnas C-502 y C-503 conjuntamente, pero el diseño mecánico de cada una se hace por separado.

Respecto al material de construcción se ha escogido acero inoxidable AISI 304L, cuya densidad es 8030 kg/m³.

Se ha seguido el mismo procedimiento de cálculo de la columna C-501. Los resultados del diseño completo de la columna C-502 se muestran en la tabla 11.3.6.3.



Tabla (1). Diseño C-502

DISEÑO MECÁNICO	
Material	AISI 304L
Presión de diseño (bar)	1,74
Temperatura de diseño (°C)	256
Tipo de platos	Perforados
DIMENSIONES	
Diámetro interior (m)	2,75
Diámetro exterior (m)	2,768
Altura cilindro (m)	4,27
Altura cabezal (m)	0,556
Altura fondo (m)	0,556
Altura total (m)	5,39
Volumen cilindro (m ³)	25,36
Volumen cabezal (m ³)	1,6822
Volumen fondo (m ³)	1,6822
Volumen total (m ³)	28,73
ESPESORES	
Espesor cilindro (mm)	9
Espesor cabezal (mm)	7
Espesor fondo (mm)	7
PESO	
Peso cilindro (kg)	2674,776525
Peso cabezal (kg)	207,36437
Peso fondo (kg)	207,36437
Peso equipo vacío (kg)	3089,505264
Peso en operación (kg)	28394
Peso con agua (kg)	31820
AISLAMIENTO TÉRMICO	
Lana de roca 100 kg/m ³ (mm)	127



11.4. SEPARADORES DE FASES

11.4.1. Separador S-201

11.4.1.1. Introducción

El separador de fases S-202 tiene como finalidad la eliminación del agua que entra procedente del destilado de las columnas C-204 / C-205. Para realizar la simulación de este tipo de equipos con el programa Aspen Hysys no es necesaria la introducción de ningún parámetro operacional. Únicamente se requiere especificar el corriente de entrada y nombrar los corrientes de salida. En la figura 11.4.1.1. se observa la simulación realizada.

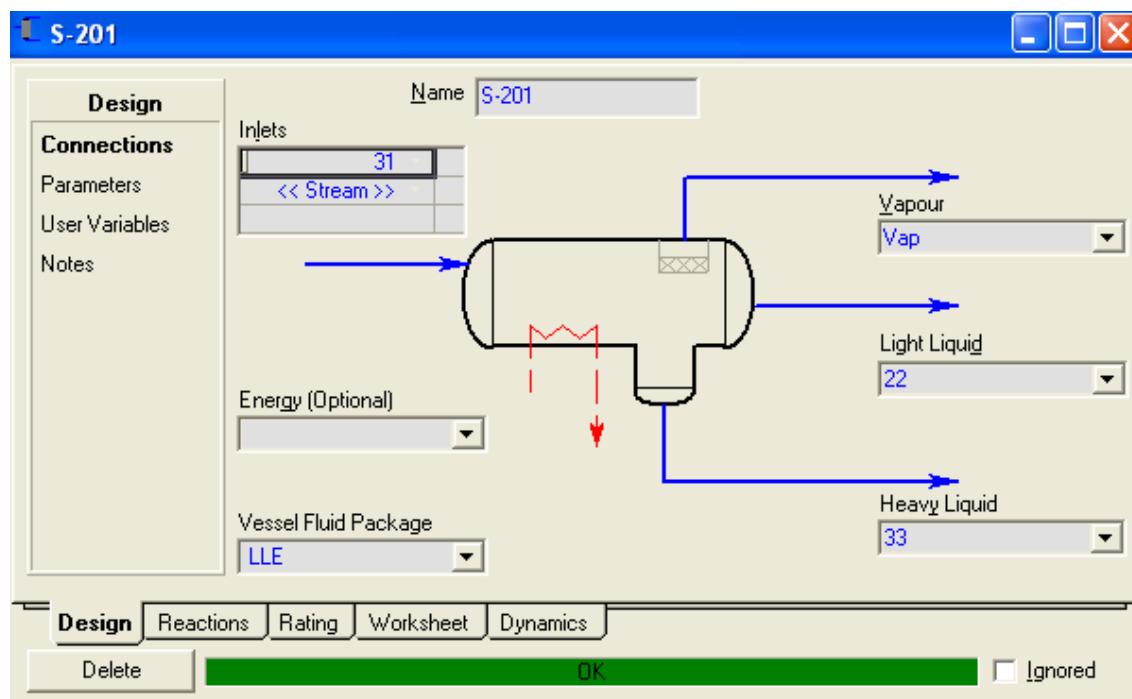


Figura 11.4.1.1. Diseño separador. S-201.

Cabe comentar que el corriente de vapor (Vap) en este caso es 0, ya que el separador de fases tiene como objetivo la separación de dos fases líquidas con densidades diferentes.



Los resultados de la simulación con Hysys que se muestran en la tabla 11.4.1.1.

Tabla 11.4.1.1. Separador de fases. S-201.

Corriente	31	22	33
Temperatura (°C)	35	35	35
Presión (bar)	1,013	1,013	1,013
Fracción de vapor	0	0	0
Caudal molar (Kmol/h)	193,710	162,718	30,976
Caudal másico (kg/h)	15553,411	992,968	558,494
Caudal volumétrico(m ³ /h)	18,10	17,54	0,56
Densidad (kg/m ³)	859,45	854,98	999,75
Entalpia (Kcal/h)	-1,55E+06	5,54E+05	-2,10E+06
FRACCIÓN MOLAR			
H ₂ O	3,59E-02	0	0,9989
CH	1,91E-04	8,72E-06	1,74E-05
CHO	3,32E-08	0	1,31E-06
TL	0,964	0,99998	9,84E-04
CAUDAL MOLAR (kmol/h)			
H ₂ O	30,970	2,06E-05	30,970
CH	3,03E-02	3,02E-02	1,35E-04
CHO	0	1,68E-06	0
TL	162,739	162,733	5,96E-03

Para facilitar la comprensión de las corrientes, la figura 11.3.4.2. muestra una captura del ambiente de simulación.

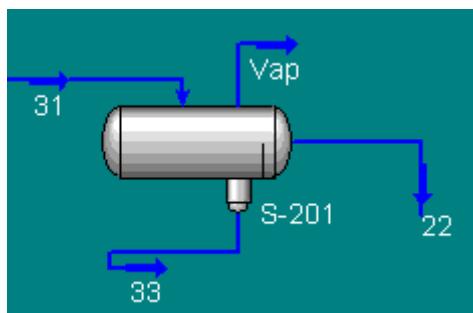


Figura 11.4.1.2. Diseño separador. S-201.

Como se puede observar, se obtienen dos corrientes, una con una elevada pureza de tolueno (22) y otra con el agua eliminada de la mezcla (33). Esta separación se obtiene gracias a la diferencia de densidad de las 2 fases, la fase orgánica (compuesta principalmente por tolueno) y la acuosa.

Este proceso se lleva a cabo con la finalidad de obtener una corriente de tolueno de elevada pureza para ser recirculado a la columna de extracción C-203. De esta manera se consigue un gran ahorro económico y de reactivos, permitiendo la viabilidad del proceso de extracción.

Cuando se generan dos fases, la mezcla de ambas está formada normalmente por una dispersión de gotas de una fase distribuidas en la otra fase (fase continua). En este caso la fase continua es el tolueno y el agua se distribuye en forma de gotas. La mezcla es termodinámicamente inestable, por lo que, dado un tiempo las gotas tienden a separarse formando 2 fases diferenciadas.

Esto sucede debido a la coalescencia de las gotas del líquido con otras gotas cercanas (coalescencia entre gotas) y con la fase que están generan (coalescencia entre gota - interfase). La velocidad a la que esto sucede es determinante a la hora de seleccionar y diseñar el equipo.

El separador de fases S-202 es un decantador gravitacional, diseñado para dar tiempo a la mezcla de dos fases líquidas a que se separen en dos capas diferenciadas.



La fuerza que promueve la coalescencia es la gravedad (g) y en el sistema dado es proporcional a $\Delta r \cdot g$, donde Δr es la diferencia de densidades entre los dos líquidos. El diámetro de las gotas es un parámetro crítico: para determinar la velocidad de la dispersión líquido-líquido el tamaño de la gota combinado con el parámetro $\Delta r \cdot g$ define la velocidad de decantación. Este principio de separación se rige por la ley de Stokes, que viene definida por la siguiente ecuación:

$$v_d = \frac{g \cdot (\rho_{ac} - \rho_{org}) \cdot d_d^2}{18 \cdot \mu_c} \quad (\text{ec. 11.4.1.1.})$$

Donde:

g es aceleración de la gravedad = 9.8 m/s².

d_d es el diámetro de la gota. Los métodos de diseño de decantadores basados en la ley de Stokes asumen normalmente este diámetro como $150 \cdot 10^{-6}$ m, considerándose un valor conservador.

v_d es la velocidad terminal de las gotas de la fase acuosa con diámetro d_d (m/s).

ρ_{ac} es la densidad fase acuosa (Kg/m³)= 999,75 Kg/m³.

ρ_{org} es la densidad fase orgánica (Kg/m³)= 854,98 Kg/m³.

μ_c es la viscosidad fase continua en N·s/m²= $4,88 \cdot 10^{-4}$ Kg/m·s.

Este método de cálculo fue definido por Hooper [Schweitzer,1997]; y Jacobs and Penney [Wiley, 1987]. De esta manera se determina que la velocidad terminal de las gotas (v_d) es de $3,58 \cdot 10^{-3}$ m/s.

Por otro lado, el área interfacial (A_i) se puede calcular como:

$$A_i = \frac{Q_c}{v_d} \quad (\text{ec. 11.4.1.2.})$$



Donde Q_{ac} es el caudal volumétrico (m^3/h) de la fase continua, que es de 17,54 m^3/h , es decir, $0,0048 m^3/s$.

De esta manera, se obtiene que el área interfacial A_i es de 1,36 m y, por lo tanto, se puede determinar el diámetro del decantador (D) con la ecuación:

$$A_i = \pi \cdot r^2 \text{ (ec. 11.4.1.2.)}$$

$$D = 2 \cdot r = 2 \cdot \sqrt{\frac{A_i}{\pi}} \text{ (ec. 11.4.1.3.)}$$

Se ha calculado el diámetro, obteniendo un resultado de 1,32 m de sección circular.

Este análisis no asume la turbulencia ni otras desviaciones debidas al líquido inmóvil, por ello se suele aplicar un factor del 20% para asegurar la separación, de manera que $D=1,58$ m.

Por otro lado, el método de cálculo utilizado determina que por simple geometría la altura del cilindro es el doble del diámetro:

$$h = 2 \cdot D \text{ (ec. 11.4.1.4.)}$$

Por lo tanto:

$$h = 2 \cdot 1,58 = 3,16 m$$

Además, la altura de la fase dispersa se considera como un 10% de la altura del separador, en este caso de 0,316 m.

Por otro lado, es necesaria la comprobación de que con estas dimensiones se obtendrá un buen coeficiente de reparto. Para ello se calcula el tiempo de residencia de la interfase y si se comprueba que esté comprendido dentro del rango de operación recomendado. Este tiempo de residencia se calcula como:

$$t = \frac{h_{interfase}}{v_d} = \frac{0,316 m}{3,58 \cdot 10^{-5} m/s} = 88 s \text{ (ec. 11.4.1.5.)}$$



Se recomienda que este tipo de equipos tengan un tiempo de residencia de la interfase de entre 60 y 300 segundos (1 - 5 minutos). Así pues, el tiempo de residencia según los cálculos realizados está comprendido dentro de este rango, por lo que se asume el diseño como válido.

11.4.1.1. *Diseño mecánico*

El separador S-202 opera a una temperatura de 32°C y a presión atmosférica. Teniendo en cuenta las mismas consideraciones de diseño de las columnas.

$$T_{dis} = 32 \cdot 1,1 = 35,2 \text{ } ^\circ\text{C} \text{ (ec. 11.4.6.)}$$

$$P_{dis} = 1 + 1 = 2 \text{ atm} = 29,39 \text{ bar (ec. 11.4.1.7.)}$$

Al igual que el resto de equipos se ha utilizado el código ASME. Cabe comentar que en este caso, se ha considerado que el fondo del equipo es de geometría plana. El cálculo del espesor del fondo se han determinado gracias a la bibliografía que el espesor del fondo se calcula como la suma de 6,5 mm más el factor de seguridad de corrosión, 2 mm; siempre y cuando, el grosor del tanque sea inferior a éste valor, ya que es recomendable, por seguridad, que el fondo del tanque tenga como mínimo este espesor.

Las condiciones de diseño del separador de fases se incluyen en la tabla 11.4.1.2.



Tabla 11.4.1.2. Parámetros. S-201.

DISEÑO MECÁNICO	
Material	AISI 304L
Presión de diseño (bar)	2
Temperatura de diseño (°C)	35,2
DIMENSIONES	
Diámetro interior (m)	1,579
Diámetro exterior (m)	1,593
Altura cilindro (m)	3,16
Altura cabezal (m)	0,32
Altura fondo (m)	-
Altura total (m)	3,48
Volumen cilindro (m ³)	6,181
Volumen cabezal (m ³)	0,326
Volumen fondo (m ³)	-
Volumen total (m ³)	6,507
ESPESORES	
Espesor cilindro (mm)	7
Espesor cabezal (mm)	6
Espesor fondo (mm)	8,5
PESOS	
Peso cilindro (kg)	884,204
Peso cabezal (kg)	58,728
Peso fondo (Kg)	127,997
Peso equipo vacío (kg)	1070,930
Peso en operación (kg)	6663,262
Peso con agua (kg)	7577,803
AISLAMIENTO TÉRMICO	
Lana de roca 80 kg/m ³ (mm)	0,5



11.4.2. Separador S-401

11.4.2.1 Introducción

Una vez realizada la neutralización (R-401) y la eliminación del amoníaco en exceso en la columna de “stripping” (C-501), se tiene una mezcla de ϵ -caprolactama, sulfato de amonio y agua. Esta mezcla está compuesta por dos fases líquidas no miscibles de densidades diferentes. Es por eso que se puede utilizar un decantador gravitatorio continuo. Las densidades se podrían considerar límites, ya que son diferentes, pero tampoco tanto. Si el decantador resultante fuera demasiado grande sería recomendable utilizar uno de tipo centrífugo en lugar de uno gravitatorio.

En este decantador gravitatorio, la mezcla de alimentación entra por un extremo del separador; los dos líquidos fluyen lentamente a través del tanque, se separan en dos capas, y se descargan por los rebosaderos situados al otro extremo del tanque.

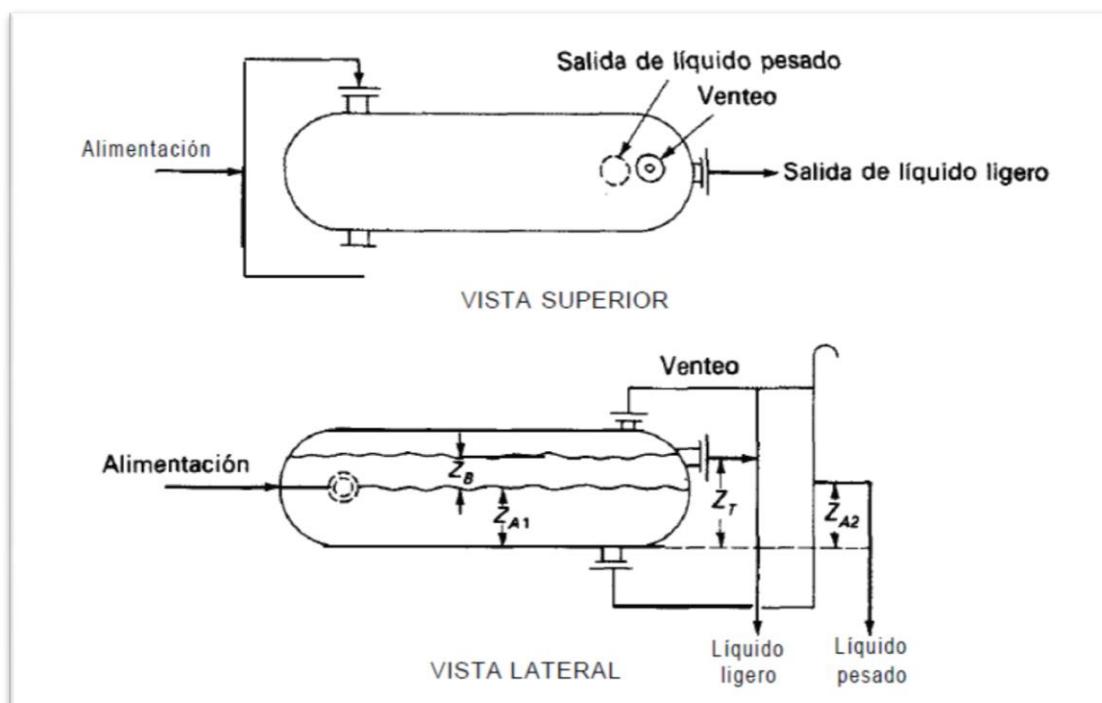


Figura 11.4.2.1.- Vista superior y vista lateral del decantador gravitatorio.



11.4.2.2 Especificaciones de las corrientes de entrada y de salida

Como se ha dicho, la entrada proviene de la columna de “stripping” (C-401), donde se ha hecho una desadsorción del exceso de amoníaco con vapor de agua. En la Tabla 11.4.2.1, se encuentran las especificaciones de dicha corriente. Se sabe también, que esta corriente está formada por dos fases, una ligera y otra pesada, y que por eso se pueden separar mediante un decantador gravitatorio. En este caso, las fases están compuestas por ϵ -caprolactama y agua, en el caso de la fase ligera, y sulfato amónico y agua, en el caso de la fase pesada.

Tabla 11.4.2.1.- Especificaciones del corriente de entrada a de S-402.

CORRIENTE 401	%W	W(Kg/h)	ρ (kg/m ³)	Q (m ³ /h)
ϵ -caprolactama	0,19	6370,90		
$(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$	0,26	8869,24		
H_2O	0,55	18503,48		
Total		33743,61	1141,31	29,57

Ahora bien, la separación gravitatoria, debido a la formación de una pequeña interfase en la que conviven ambas fases, no será perfecta, provocando la existencia de ciertas impurezas en las dos corrientes de salida. En la fase pesada, éstas serán de ϵ -caprolactama y en la ligera de sulfato de amonio. Calcular estos rendimientos matemáticamente a partir de densidades y balances es una ardua tarea, y además no es exacta; resultan más fiables resultados experimentales. Por esta razón, y para tener una idea de la eficacia del decantador gravitatorio, se ha recurrido a valores bibliográficos, concretamente los detallados en la patente WO/2001/012549A1. En



esta patente se especifica la composición de cada corriente de salida con porcentajes másicos de cada fase, obtenidas en una decantación real.

Respetando la composición másica de la fase ligera especificada por dicha patente (que corresponde a un 69% en peso de ϵ -caprolactama, un 1% de impurezas de sulfato amónico y el resto agua), y teniendo en cuenta los caudales másicos de entrada, se ha realizado el balance de materia del decantador gravitatorio (S-401), calculando así los caudales másicos de salida del decantador, tanto de la corriente que contiene la fase ligera, como de la contenedora de la fase pesada. En la Tabla 11.4.2.2., se pueden observar estos porcentajes y el caudal másico al que corresponden.

Tabla 11.4.2.2.- Especificaciones de los corrientes de salida de D-402.

CORRIENTE 069	%W	W(Kg/h)	ρ (kg/m ³)	Q (m ³ /h)
ϵ -caprolactama	0,69	6348,00		
H ₂ O	0,30	2760,29		
(NH ₄) ₂ SO ₄	0,01	92,00		
Total		9200,00	1035,99	8,88
CORRIENTE 070	%W	W(Kg/h)	ρ (kg/m ³)	Q (m ³ /h)
(NH ₄) ₂ SO ₄	0,358	8777,24		
H ₂ O	0,641	15743,48		
ϵ -caprolactama	0,001	22,90		
Total		15811,40	1186,15	20,69



De esta manera, y tal y como se especifica en la Tabla 11.4.2.3., se puede ver como se cumple el balance de materia, y como al no haber cambio de fase o de las condiciones de operación, los caudales volumétricos también son iguales.

Tabla 11.4.2.3.-Balance de materia de D-402.

	Entrada		Salida	
Componente	W(Kg/h)	Q (m ³ /h)	W(Kg/h)	Q (m ³ /h)
ε-caprolactama	6370,90		6348,00 + 22,90 = 6370,9	
(NH ₄) ₂ SO ₄	8869,24		92,00 + 8777,24 = 8869,24	
H ₂ O	18503,48		2760,29 + 15743,48 = 18503,48	
TOTAL	33743,61	29,57	33743,61	8,88 + 20,69 = 29,57

11.4.3.1. Dimensionamiento

Para dimensionar el decantador gravitatorio S-401, se ha seguido el método propuesto por Mc Cabe. Éste hace un balance hidrostático para determinar la relación entre las diferentes alturas que definen el decantador. Aislando el parámetro Z_{A1} se llega a la ecuación 11.4.2.1.

$$Z_B \cdot \rho_B + Z_{A1} \cdot \rho_A = Z_{A2} \cdot \rho_A$$



Aislando Z_{A1} :

$$Z_{A1} = Z_{A2} - Z_B \cdot \frac{\rho_B}{\rho_A}$$

Considerando $Z_T = Z_{A1} + Z_B$ y substituyendo en la ecuación anterior se obtiene:

$$Z_{A1} = \frac{Z_{A2} - Z_T \cdot (\rho_B / \rho_A)}{1 - (\rho_B / \rho_A)} \quad (\text{Ecuación 11.4.2.1})$$

Dónde:

- ρ_A , es la densidad del líquido pesado
- ρ_B , es la densidad del líquido ligero
- Z_{A1} , es la altura de la capa de líquido pesado
- Z_B , es la altura de líquido ligero
- Z_T , es la altura de líquido total en el tanque
- Z_{A2} , es la altura del rebosadero del líquido pesado

En la Figura 11.4.2.1. también se pueden ver representadas las diferentes alturas justamente mencionadas.

Además, el método también hace uso de una correlación, ecuación 11.4.2.2., para determinar el tiempo de separación necesario.

$$t = \frac{6,24 \cdot \mu}{\rho_A - \rho_B} \quad (\text{Ecuación 11.4.2.2})$$

Dónde:



- t , es el tiempo de separación necesario en horas
- μ , es la viscosidad de la fase continua en cP
- ρ_A , es la densidad del líquido pesado en lb/ft³
- ρ_B , es la densidad del líquido ligero en lb/ft³

El método además advierte que, en caso de que las densidades de las dos fases sean aproximadamente iguales, la interfase es sensible a variaciones de Z_{A2} , y que se deberá operar con cuidado. En todo caso, como el rebosadero será móvil, se podrá modificar Z_{A2} durante la operación.

Siguiendo el método propuesto por Mc Cabe, y buscando las propiedades requeridas ya se podrá hacer el dimensionamiento del decantador.

De cualquier forma, primero hay que reconocer cuál es la fase continua. Para hacerlo, el criterio seguido ha sido el siguiente: el componente mayoritario de la corriente de entrada (069) es el agua, por lo tanto, la fase con un contenido más elevado de ésta, ya que el agua coexiste en las dos fases, será la fase continua. En la Tabla 11.4.2.2., se puede apreciar como la fase con un contenido de agua más elevado es la pesada, por lo tanto ésta corresponderá a partir de ahora, a la fase continua.

El primer paso será calcular el tiempo de retención aplicando substituyendo las propiedades de la Tabla 11.4.2.4 en la ecuación 11.4.2.2.:

Tabla 11.4.2.4.-Propiedades físicas de la fase ligera y pesada

ρ_A (lb/ft ³)	74,05
ρ_B (lb/ft ³)	64,61
$\mu_{fase continua}$ (cP)	1,7

Viscosidad →<http://www.furrowpump.com/Vol%2010.pdf>



$$t = \frac{6,24 \cdot 1,7}{74,05 - 64,61} = 1,12 \text{ horas}$$

A continuación se calcula la retención de líquido, es decir, el volumen total que ha de contener el decantador:

$$8,88 + 20,69 = 29,57 \frac{m^3}{h} \cdot 1,12 h = 33,12 m^3$$

Teniendo en cuenta que el decantador debe estar lleno entre el 95 y el 100 % de su capacidad:

$$\frac{33,12 m^3}{0,95} = 34,86 m^3$$

Por lo tanto, el decantador deberá tener un volumen de $34,86 m^3$.

El decantador estará en posición horizontal, tal y como se aprecia en la Figura 11.4.2.1., por esta razón se considerará longitud y no altura de decantador. Teniendo en cuenta que normalmente estos equipos tienen una longitud de aproximadamente 5 veces el diámetro, y que la forma será cilíndrica, podemos calcular la longitud y el diámetro de la parte cilíndrica del tanque.

$$L = 5 \cdot D \quad (\text{Ec. 11.4.2.3})$$

$$V_{cilindro} = \frac{\pi}{4} \cdot D^2 \cdot L = 34,86 m^3 \quad (\text{Ec. 11.4.2.4})$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones se encuentra un diámetro de 2,07 m una longitud de 10,36 m.



Por último, es necesario determinar las alturas de líquido total en el tanque (Z_T), la altura de la capa de líquido pesado (Z_{A1}), la altura de líquido ligero (Z_B) y la altura del rebosadero del líquido pesado (Z_{A2}). Como ya se ha mencionado, la fracción del volumen del tanque ocupada por el líquido es del 90%; como consecuencia, la altura del líquido será el 90% del diámetro:

$$Z_T = 0,90 \cdot 2,07m = 1,86m$$

Por otra banda, y suponiendo que la interfase está a igual distancia del fondo del tanque que de la superficie del líquido, se puede calcular la altura de la capa de líquido pesado:

$$Z_{A1} = \frac{1,86m}{2} = 0,93m$$

Lógicamente, al suponer un distancia igual del fondo a la superficie de líquido, la altura de líquido ligero, será también $Z_B=0,93m$.

Finalmente, substituyendo las alturas calculadas en la expresión del balance hidrostático, ecuación 11.4.2.1., y aislando, se puede determinar la altura del rebosadero del líquido pesado:

$$0,93 = \frac{Z_{A2} - 1,86 \cdot \left(\frac{64,61}{74,05}\right)}{1 - \left(\frac{64,61}{74,05}\right)} \rightarrow Z_{A2} = 1,82m$$

11.4.3.2. Diseño mecánico



Este diseño, como también se da en otros equipos, será para un tanque cilíndrico con cabezales toriesféricos o de Knoppel (Figura 11.4.2.1.), se hará de la misma manera que los equipos que también tienen este tipo de cabezal normalizado.

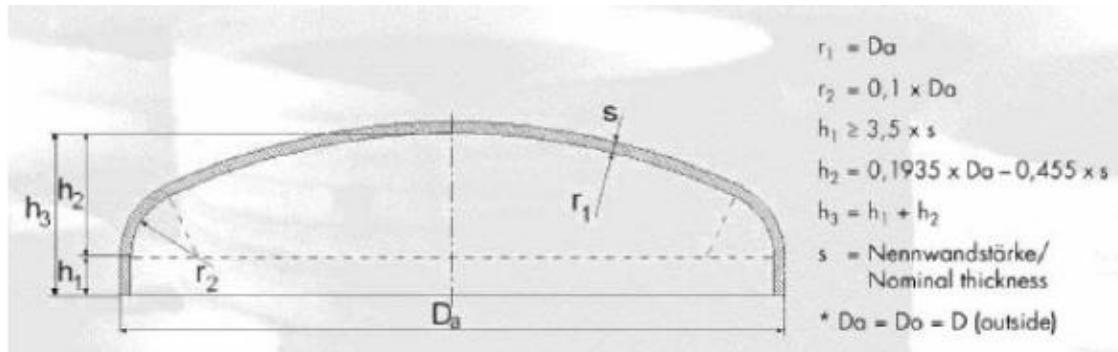


Figura 11.4.2.1.- Esquema de un cabezal toriesférico

■ ESPESOR DE LA PARTE CILÍNDRICA DEL DECANTADOR:

Para calcular el espesor de la pared del tanque es necesario conocer ciertas condiciones de operación como son temperatura, presión, diámetro interno, factor de soldadura (E) y límite elástico o factor de estrés (S).

Hay que diferenciar entre temperatura y presión de diseño y operación. La temperatura y presión de diseño se pueden calcular con las ecuaciones 11.4.2.5 y 11.4.2.6 respectivamente.

$$T_{diseño} = T_{operación} + 20^\circ\text{C} = 35^\circ\text{C} + 20^\circ\text{C} = 55^\circ\text{C} \quad (\text{Ecuación 11.4.2.5})$$

$$P_d = P_{o \text{ absoluta}} + 1 \text{ atm} \quad (\text{Ecuación 11.4.2.6})$$

$$P = \Delta P + P_d \quad (\text{Ecuación 11.4.2.7})$$



Teniendo en cuenta que el equipo opera a presión atmosférica, la presión de diseño será de 2 atm. Como se observa, la presión para calcular el espesor, al estar el tanque en posición horizontal, tiene en cuenta la presión que ejerce la columna de líquido a parte de la presión de operación. Para determinar dicha presión, se hace uso de la ecuación 11.4.2.8.

$$\Delta P = \rho \cdot g \cdot h_{líquido} \text{ (Ecuación 11.4.2.8)}$$

En el caso de la fase ligera:

$$\Delta P = 1035,99 \frac{Kg}{m^3} \cdot 9,8 \frac{m}{s^2} \cdot 0,93 m = 9442,01 Pa$$

En cuanto a la fase pesada:

$$\Delta P = 1186,15 \frac{Kg}{m^3} \cdot 9,8 \frac{m}{s^2} \cdot 0,93 m = 10810,57 Pa$$

Por lo tanto, la presión que ejercerá el líquido será:

$$\Delta P = 9442,01 Pa + 10810,57 Pa = 20252,58 Pa = 0,199872 atm$$

Ahora ya se puede obtener la presión para calcular el espesor:

$$P = 0,199872 + 2 = 2,199872 atm$$



En cuanto al factor de soldadura, éste será de $E=0,85$, ya que se decide hacer soldaduras simples con radiografiado parcial, porque el equipo no será un decantador que trabajará a alta presión.

En referencia a límite elástico, éste depende obviamente del material de construcción. Para decidir el material de construcción, como se ha hecho en equipos anteriores, se ha consultado la guía de la empresa “*Harrington Industrial Plastics*”. La ε-caprolactama no aparece en el manual, pero ésta no es corrosiva. En cuanto al agua, la guía clasifica con compatibilidad excelente el acero al carbono, la cerámica, el acero inoxidable y “*Hastelloy C*”. En el caso del sulfato de amonio, los materiales categorizados como excelentes son el acero al carbono, la cerámica y “*Hastelloy C*”, aunque se ha comprobado, que debido al alto nivel de corrosión que puede provocar los compuestos que contienen amoníaco (de hecho, en la misma guía se categoriza como excelente para las soluciones acuosas de amoníaco el Acero Inoxidable AISI 316), industrialmente están construido con acero inoxidable AISI 316-L. Por todo lo dicho, se decide hacer el equipo de Acero Inoxidable AISI 316-L. El límite elástico se puede leer en la Tabla 11.4.2.5.; para la temperatura de diseño tiene un valor de 15700 psi (1068,32 atm).

Tabla 11.4.2.5.-Tensión máxima admisible en función de la temperatura para

Specification		Maximum Allowable Stress, ksi (Multiply by 1000 to Obtain psi), for Metal Temp., °F, Not Exceeding									
Number	Grade	-20 to 100	200	300	400	500	600	650	700	750	800
SA-240	304	18,8	17,8	16,6	16,2	15,9	15,9	15,9	15,9	15,5	15,2
SA-240	304L	15,7	15,7	15,3	14,7	14,4	14	13,7	13,5	13,3	13
SA-240	316	18,8	18,8	18,4	18,1	18,0	17,0	16,7	16,3	16,1	15,9
SA-240	316L	15,7	15,7	15,7	15,5	14,4	13,5	13,2	12,9	12,6	12,4

diferentes aceros inoxidables



Ahora, con la ecuación 11.4.2.9., ya se puede calcular el espesor de la parte cilíndrica del decantador.

$$t_{cilindro} = \frac{P \cdot R}{S \cdot E + 0,4 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad (\text{Ecuación 11.4.2.9})$$

Dónde:

- $t_{cilindro}$, es el espesor de la parte cilíndrica en mm
- P , es la presión para calcular el espesor en atm
- R , es el radio de la parte cilíndrica en mm
- S , es la tensión máxima admisible en atm
- E , es el factor de soldadura
- C_1 , es la tolerancia a la corrosión en mm
- C_2 , es la tolerancia a la fabricación en mm

Igual que en los casos anteriores, C_1 tendrá un valor de 1,5 mm y C_2 , un valor de 1 mm. Substituyendo y redondeando al alza:

$$t_{cilindro} = \frac{2,2 \cdot \left(\frac{2,07}{2}\right) \cdot 10^3}{1068,32 \cdot 0,85 + 0,4 \cdot 2,2} + 1,5 + 1 = 5,00 \text{ mm} \rightarrow 5 \text{ mm}$$

■ ESPESOR DE LOS CABEZALES:

En el caso de los cabezales, como el tanque está en posición horizontal, en el punto dónde más presión habrá, ésta será la ejercida por el fluido más la presión de operación. Por lo tanto, la presión de diseño tendrá el mismo valor que en el caso anterior. La misma situación se da con la temperatura, la tensión máxima admisible y el factor de soldadura.



En cualquier caso, según el código ASME, el espesor de los cabezales, se calcula de diferente manera. Según esta normativa, para decidir que expresión se debe emplear, se tiene que calcular la relación entre el radio interior del cabezal y el radio interior de las curvaturas. De acuerdo con la Tabla 11.4.2.7, el radio interior de las curvaturas se puede calcular como:

$$r_2 = 0,1 \cdot D = 0,1 \cdot 2,07 = 0,207 \text{ m} \cdot \frac{1''}{0,0254 \text{ m}} \cdot 0,1 = 8,15'' \quad (\text{Ecuación 11.4.2.10})$$

Por lo tanto, dicha relación tendrá un valor de:

$$r_1 = D = 2,07 \cdot \frac{1''}{0,0254 \text{ m}} = 81,50''$$

$$\frac{r_1}{r_2} = \frac{81,50''}{8,15''} = 10 \quad (\text{Ecuación 11.4.2.11})$$

Como la relación es menor a $16 \frac{2}{3}''$, en el código ASME, se recomienda utilizar la ecuación 11.4.2.12.

$$t_{cabezal} = \frac{P \cdot R \cdot M}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad (\text{Ecuación 11.4.2.12})$$

Dónde:

- $t_{cabezal}$, es el espesor de los cabezales toriesféricos en mm



- P_d , es la presión de diseño en atm
- R , es el radio interno en mm
- S , es la tensión máxima admisible en atm
- E , es el factor de soldadura
- C_1 , es la tolerancia a la corrosión en mm
- C_2 , es la tolerancia a la fabricación en mm
- M , factor que depende de la relación R/r_2

En la Tabla 11.4.2.6., se especifican los valores que tiene el factor M, según la relación r_1/r_2 . Como se observa, en este caso, el valor del factor M será 1,54.

Tabla 11.4.2.6.-Valores del factor M en función de la relación R/r_2

R/r_2	M	R/r_2	M	R/r_2	M	R/r_2	M
1,00	1,00	3,00	1,18	6,50	1,39	10,50	1,56
1,25	1,03	3,25	1,20	7,00	1,41	11,00	1,58
1,50	1,06	3,50	1,22	7,50	1,44	11,50	1,60
1,75	1,08	4,00	1,25	8,00	1,46	12,00	1,62
2,00	1,10	4,50	1,28	8,50	1,48	13,00	1,65
2,25	1,13	5,00	1,31	9,00	1,50	14,00	1,69
2,50	1,15	5,50	1,34	9,50	1,52	15,00	1,72
2,75	1,17	6,00	1,36	10,00	1,54	16,00	1,75
						16 2/3	1,77



Se asumirá que el diámetro interno de los cabezales será igual al de la parte cilíndrica.

Substituyendo y redondeando al alza se obtiene:

$$t_{cabezal} = \frac{2,2 \cdot 1,035 \cdot 10^3 \cdot 1,54}{2 \cdot 1068,2 \cdot 0,85 - 0,2 \cdot 2,2} + 1,5 + 1 = 3,43 \text{ mm} \rightarrow 5 \text{ mm}$$

- DIMENSIONES DE LOS CABEZALES TORIESFÉRICOS:

Según la normativa ASME ("American sociaety of Mechanical Engineers"), las dimensiones del cabezal se pueden calcular de acuerdo con las correlaciones de la Tabla 11.4.2.7.:

Tabla 11.4.2.7.-Parámetros del cabezal toriesférico

Tipo de Cabezal	Toriesférico ASME
Volumen	$0,08089 \cdot D^3$
Área	$0,931 \cdot D_0^3$
Altura	$0,169 \cdot D$
r_1	D
r_2	$0,1 \cdot D$
h_1	$3,5 \cdot t$
h_2	$0,1935 \cdot D - 0,455 \cdot t$
h_3	$h_1 + h_2$



Teniendo en cuenta que el diámetro interno del cabezal será igual que el del decantador, como se ha explicado en el apartado anterior, se dimensiona el cabezal:

$$h_1 = 3,5 \cdot t = 3,5 \cdot 5 \cdot 10^{-3} = 0,0175 \text{ m} \quad (\text{Ecuación 11.4.2.13})$$

$$h_2 = 0,1935 \cdot D - 0,455 \cdot t = 0,1935 \cdot 2,07 - 0,455 \cdot 5 \cdot 10^{-3} = 0,398 \text{ m} \quad (\text{Ecuación 11.4.2.14})$$

$$h_3 = h_1 + h_2 = 0,0175 + 0,398 = 0,4155 \quad (\text{Ecuación 11.4.2.15})$$

$$V_{cabezal} = 0,08089 \cdot D^3 = 0,08089 \cdot (2,07 \text{ m})^3 = 0,72 \text{ m}^3 \quad (\text{Ecuación 11.4.2.16})$$

De esta manera, el volumen total del tanque será:

$$V_{tanque} = V_{cilindro} + V_{cabezales} = 34,86 + 2 \cdot 0,72 = 36,3 \text{ m}^3 \quad (\text{Ecuación 11.4.2.17})$$

Ahora, es posible conocer también la longitud total del tanque:

$$L_{tanque} = L_{cilindro} + L_{cabezales} = 10,36 + 2 \cdot 0,413 = 11,19 \text{ m} \quad (\text{Ecuación 11.4.2.18})$$

11.4.3.3. Peso total del decantador

El peso total del decantador será el peso de éste más el del líquido que contendrá. Primero se calcula el peso del tanque vacío con la ecuación 11.4.2.19.:



$$P_{vacío} = P_{cilindro} + P_{cabezas} \quad (\text{Ecuación 11.4.2.19})$$

Dónde:

- $P_{cilindro}$, es el peso de la parte cilíndrica (sin las tapas) en kg
- P_{cabeza} , es el peso de los cabezales toriesféricos en kg

Entonces, en primera instancia, se deben estimar estos pesos con las ecuaciones 11.4.2.20. y 11.4.2.21.:

$$P_{cabezas} = 2 \cdot (V_{cabezal chapa} \cdot \rho_{AISI 316-L}) = 2 \cdot \left\{ \left[\frac{2}{3} \cdot \pi \cdot ((R + t_{cabeza})^3 - R^3) \right] \cdot \rho_{AISI 316-L} \right\} \quad (\text{Ecuación 11.4.2.20})$$

$$P_{cilindro} = A_{cilindro sin tapas} \cdot t_{cilindro} \cdot \rho_{AISI 316-L} = \pi \cdot D \cdot h_{cilindro} \cdot t_{cilindro} \cdot \rho_{AISI 316-L} \quad (\text{Ecuación 11.4.2.21})$$

Dónde:

- $\rho_{AISI304L}$, es la densidad del acero inoxidable AISI 316-L en kg/m³
- $V_{cabezal chapa}$, es el volumen de chapa de los cabezales toriesféricos en m³
- $A_{cilindro sin tapas}$, es la superficie de la parte cilíndrica (las paredes del tanque) en m²
- $t_{cilindro}$, es el espesor de las paredes cilíndricas en m
- r , es el radio del tanque en m
- D , es el diámetro de tanque en m

Substituyendo:



$$P_{cabezas} = 2 \cdot \left\{ \left[\frac{2}{3} \cdot \pi \cdot \left(\frac{2,07}{2} + 5 \cdot 10^{-3} \right)^3 - \left(\frac{2,07}{2} \right)^3 \right] m^3 \cdot 7980 \frac{Kg}{m^3} \right\}$$

$$= 539,71 \text{ Kg}$$

$$P_{cilindro} = \pi \cdot 2,07 \text{ m} \cdot 10,36 \text{ m} \cdot 5 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot 7980 \frac{Kg}{m^3} = 2688,15 \text{ Kg}$$

De forma que el peso del tanque vacío será:

$$P_{vacío} = 2688,15 \text{ Kg} + 539,71 \text{ Kg} = 3227,86 \text{ Kg}$$

Ahora ya se puede calcular el peso del tanque operativo, teniendo en cuenta el volumen de líquido contenido en el tanque y las densidades de cada fase.

$$P_{operativo} = 3227,86 \text{ Kg} + \frac{34,86}{2} \text{ m}^3 \cdot 1035,99 \frac{Kg}{m^3} + \frac{34,86}{2} \text{ m}^3 \cdot 1186,15 \frac{Kg}{m^3} =$$

$$41959,76 \text{ Kg} \quad (\text{Ecuación 11.4.2.22})$$

También se calcula el peso del equipo cuando éste está lleno de agua:

$$P_{agua} = 3227,86 \text{ Kg} + 34,86 \text{ m}^3 \cdot 998,98 \frac{Kg}{m^3} = 38052,30 \text{ Kg} \quad (\text{Ecuación 11.4.2.22})$$

11.4.3.4. Especificaciones del decantador



A modo de resumen, en la Tabla 11.4.2.8. se adjuntan las especificaciones más importantes

1.4.3. Separador S-501

11.4.3.1. Introducción

El separador S-501 tiene como objetivo separar el azeótropo heterogéneo originado en las corrientes de destilado de las columnas C-502 y C-503, respectivamente. Como se ha comentado anteriormente, este azeótropo heterogéneo contiene agua y benceno, los cuales son inmiscibles entre ellos. Esta característica es utilizada por este separador para separar estas dos fases líquidas, mediante un diseño por decantación.

El resultado de la separación por decantación son dos corrientes, una residual, que contiene mayormente agua y trazas de benceno y se envía al área de tratamiento de residuos líquidos y gaseosos, y por otra parte, una corriente que contiene benceno en su totalidad, el cual es recirculado hacia la columna de extracción C-501, en la cual se aprovecha de nuevo el benceno utilizado en la purificación de la caprolactama. Más adelante, antes de entrar en el extractor, las pérdidas de benceno en el proceso de purificación son repuestas con disolvente benceno fresco. De esta forma, hay un ahorro económico muy grande en las cantidades necesarias de benceno, ya que éstas son muy elevadas.



Así pues, mediante la simulación del equipo en el programa Aspen Hysys se han obtenido los siguientes resultados de separación.

Tabla 11.4.3.1. Parámetros. S-201.

Nombre corriente	99	100	101
Temperatura (°C)	9	9	9
Presión (bar)	1,013	1,013	1,013
Fracción de vapor	0	0	0
Caudal molar (kmol/h)	896,8	896,152	0,6484
Caudal másico (kg/h)	70010	69998	11,7
Caudal volumétrico (m ³ /h)	78,74	78,74	0,011476
Densidad (kg/m ³)	889,1	889,09	1019
FRACCIÓN MÁSICA			
H ₂ O	0,0002	0	0,9986
BZ	0,9998	1	0,0014
CAUDAL MOLAR (kmol/h)			
H ₂ O	0,7772	0	0,64853946
BZ	896,1	896,152	2,10E-04

11.4.3.2. Diseño general

Siguiendo el método empleado para el cálculo del decantador S-201, los resultados de diseño se incluyen en la tabla 11.4.3.1.



Tabla 11.4.3.2. Parámetros. S-201.

DISEÑO MECÁNICO	
Material	AISI 304L
Presión de diseño (bar)	2,02
Temperatura de diseño (°C)	29
Tipo de separador	Vertical
DIMENSIONES	
Diámetro interior (m)	4,53
Diámetro exterior (m)	4,55
Altura cilindro (m)	9,08
Altura cabezal (m)	0,92
Altura fondo (m)	0,92
Altura total (m)	10,92
Volumen cilindro (m ³)	146,6
Volumen cabezal (m ³)	7,54
Volumen fondo (m ³)	7,54
Volumen total (m ³)	161,68
ESPESORES	
Espesor cilindro (mm)	12
Espesor cabezal (mm)	12
Espesor fondo (mm)	14
PESO	
Peso cilindro (kg)	12495,73896
Peso cabezal (kg)	885,5700889
Peso fondo (kg)	885,5700889
Peso equipo vacío (kg)	14266,87913
Peso en operación (kg)	165071
Peso con agua (kg)	175947



11.5. Purificación del sulfato de amonio

11.5.1. Alternativas de purificación

El sulfato de amonio tradicionalmente se considera un fertilizante de características pobres comparado con otros más comunes como pueden ser la urea o el nitrato amónico; principalmente debido a su bajo contenido en nitrógeno, un 21% comparado con el 45% de la urea. Se producen aproximadamente 17 millones de toneladas por año, la mayoría del cual, se obtiene como subproducto, como en este caso. Se deduce entonces, que su purificación y desarrollo, se debe más a necesidades relacionadas con otros procesos químicos de producción más que por la demanda del mercado de fertilizantes.

Normalmente en la purificación de este fertilizantes la cristalización evaporativa y/o reactiva, la operación básica de tratamiento más utilizada para este sólido, dependiendo de situaciones internas del proceso y/o situación energética.

En cuanto a la calidad, la tendencia del mercado es producir lo que comúnmente se conoce como sulfato amónico granular ("granular AS quality"). De hecho, este se produce casi de manera exclusiva en su forma cristalina y las dos estrategias más aplicadas para conseguirlo son la cristalización reactiva y la cristalización evaporativa.

En la cristalización reactiva, la reacción entre el ácido sulfúrico y el amoníaco se da *in situ*, en el propio cristalizador. La reacción crea un supersaturación del soluto y la consecuente precipitación de los cristales. El calor de la disolución y la reacción, si se usan los reactivos en las concentraciones correctas, es suficiente para hacer funcionar el proceso sin ninguna fuente externa de energía para proporcionar el calor necesario para la evaporación. El perfil de supersaturación, así como la cinética de cristalización del sulfato amónico, son diferentes de las de la cristalización evaporativa tradicional. En una unidad de evaporación, normalmente el sistema está subsaturado y se requiere calor para eliminar el agua y crear la supersaturación necesaria para el proceso de cristalización. La mayoría del sulfato amónico, sobre el 80-90%, se produce de manera



evaporativa; tal y como se hará en esta planta de producción de caprolactama. Los cristalizadores industriales más utilizados son:

- El cristalizador de circulación forzada (FC)
- El cristalizador “Draft Tube Baffle” (DTB) o de turbulencia
- El cristalizador “Oslo” o de crecimiento o cristal

Todos ellos pueden ser utilizados de forma evaporativa o reactiva. En la Figura 11.5.1., se pueden observar estos cristalizadores.

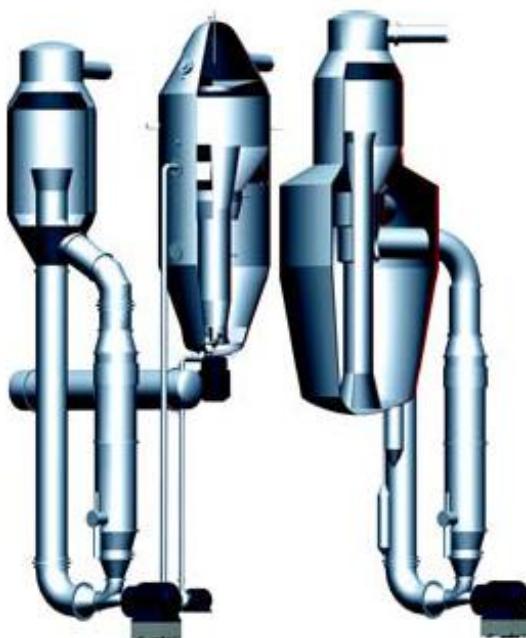


Figura 11.5.1.- Esquema de los principales cristalizadores industriales. De izquierda a derecha: FC, DTB y Oslo

A continuación se explicara de manera general cada uno de estos modelos:

- **FC (cristalización evaporativa):** El cristalizador de circulación forzada es la aplicación práctica del cristalizador de mezcla en suspensión y eliminación de producto en mezcla. Se compone básicamente de un cuerpo de cristalización, un circulación externa circular cuyo caudal se



mantiene gracias a un bomba de hélice o de turbina y un intercambiador de carcasa y tubos. La agitación interna se proporciona por un circulador externo que además debe satisfacer los requerimientos de calor necesarios para alcanzar el estado de supersaturación.

Gracias a su simplicidad y facilidad de diseño y operación, es uno de los pilares de la cristalización en la industria y encaja tanto en la evaporación simple como de múltiples efectos con o sin reutilización del vapor producido, ambos por recompresión térmica (usando repetidores de vapor) o utilizando compresores mecánicos.

Los cristales que se obtiene suelen tener un tamaño del orden de 0,5-1,0 mm; tamaño considerado más bien pequeño para un fertilizante como el sulfato de amonio. Es por esto razón que este tipo de unidad suelen ser utilizadas para operaciones pequeñas o en situaciones en las que por otras razones no se puede dar la producción de un producto tosco (por ejemplo, cuando haya un gran nivel de impurezas o cuando las aguas madres son de una viscosidad considerable).

- **DTB (cristalización evaporativa):** Los DTB son los equipos más utilizados hoy en día en la producción en grande escala del sulfato de amonio (en los últimos diez años, más del 80% de sulfato de amonio comercializado proviene de DTB's).

El tamaño del cristal que se da en estas unidades es por lo general superior a los 2 mm. Si se decide hacer pasar el cristal por molinos a continuación, y después de un secado, se pueden llegar a obtener granos de 2,4 mm e incluso 3 mm.

El DTB es un cristalizador pensado para la producción masiva de sulfato de amonio, proporcionando además, cristales homogéneos. Se compone principalmente de un cuerpo de cristalización donde los cristales que están creciendo se encuentran suspendidos en las aguas madres y son agitados de manera gentil por un agitador de turbina. Todo este montaje está rodeado por un bafle anular desde el cual una corriente de vapores de las aguas madre con cristales en suspensión se



extrae y se envía a un intercambiador de calor en caso de que también sea un sistema evaporativo. La redisolución de éstos por calor o su dilución permitirá un control de la población de cristales y la producción de partículas con un tamaño mayor.

Los cristales producidos son extraídos en forma de mezcla con agua y enviados a un equipo capaz de extraer el agua presente, mientras que las aguas madres son recirculadas de nuevo al cristalizador.

La única desventaja es que para cualquier sistema capaz de producir cristales de manera masiva, el DTB tenderá a una tendencia cíclica en la distribución de los tamaños de los cristales. La razón a este hecho es que resulta extremadamente difícil mantener un equilibrio de la superficie real de los cristales en el cristalizador con el área superficial requerida para una disposición ordenada de la masa de cristales generada por sobresaturación. El área superficial es función de la distribución de los tamaños de los cristales ("Crystals Size Distribution" o CSD), la cual es resultado del equilibrio de la población de cristales determinada por factores como la destrucción de polvos en la circulación externa circular, la generación de núcleos de cristalización en la circulación interna y la retiración clasificada de cristales producidos.

En un DTB, cuando la capacidad de destrucción de polvos sobrepasa la tasa de nucleación, los cristales se hacen más y más grandes y la superficie disponible para de sobresaturación por crecimiento de los cristales existentes disminuye hasta un punto crítico en el cual se da nucleación espontánea y se forma de manera masiva una nueva población de núcleos. La frecuencia del ciclo, dependiendo en el diseño y las características de operación del cristalizador, puede tener una duración de diversas horas a diversos días (Widua et al, 2000). El efecto cíclico será menos notorio en equipos en los que se operan varios cristalizadores.



Como se puede imaginar, dicho efecto cíclico es indeseable; por eso, durante muchos años, la industria y sus ingenieros han pensado diferentes métodos correctivos. Uno de los más efectivos es medir la CSD, y determinar a partir de ella la superficie de cristal disponible; cuando dicha superficie disminuya (lo que significa que los cristales están creciendo en exceso), se deberá añadir al cristalizador una cantidad conocida de partículas finas o polvos des de una fuente externa. Unas pocas unidades se operan de esta manera alrededor del mundo, consiguiendo no tan sólo el efecto cíclico, sino también aumentando el tamaño medio de los cristales.

El grado de control del efecto cíclico depende, entre otros, de la frecuencia con la que se determina la CSD. Normalmente se hace un muestreo cada de dos a ocho horas. En escalas granes, no se hace monitorización on-line. Debido al precio más elevado que tienen los cristales de mayor tamaño, el control del tamaño del cristal es uno de los puntos más importantes. En la Figura 11.5.2., se pueden observar cristales de sulfato de amonio de diferentes tamaños observador en un ciclo de cristalización de 20 horas.

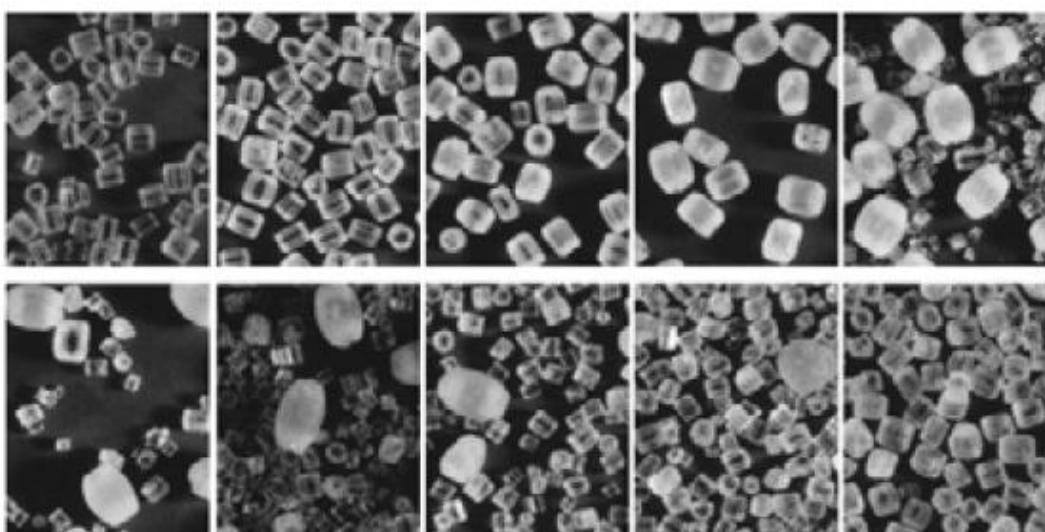




Figura 11.5.2.- Ciclo de 20 horas en un DTB: variación del diámetro del cristal de los 1,8 a los 3,55 mm. Tamaño medio del cristal de 2,55 mm.

- **OSLO (cristalización evaporativa):** En un cristalizador tipo OSLO, la suspensión de cristales en crecimiento se lleva a cabo en un lecho fluidizado, donde los cristales presentes, excepto de los muy finos, permanecen. La solución fluidizada, mientras que atraviesa la circulación exterior, se mantiene libre de cristales, con la intención de que no se sedimentación en las partes bajas del cristalizador; esto reducirá la nucleación secundaria por la abrasión de cristales, con la intención de producir de manera masiva. Ésta es la configuración típica para sistema con dos salidas (Double Draw Off), en las que se dan diferentes tiempos de residencia: mayores para el sólido con respecto a los de las aguas madre.

Como esta circulación determina a la vez los valores de la agitación interna, de la fluidización de cristales, de la sobresaturación, y de la demanda de intercambio de calor, se debe vigilar para satisfacer las necesidades del proceso. Una circulación muy lenta resultará en una tasa baja de nucleación secundaria, dando lugar a cristales de mayor tamaño, pero a la vez, aumentando la sobresaturación y formando incrustaciones. Por el contrario, una circulación excesiva, puede crear perturbaciones en el lecho fluidizado y arrastrar cristales a la circulación externa, conduciendo al sistema a operar en un régimen de cristalización forzada.

Por lo general, un cristalizador tipo OSLO puede producir cristales de mayor tamaño que los que se dan en un DTB (normalmente de unos 2,6 mm). Ahora bien, esto se consigue a costa de un cristalizador que requiere un volumen mínimo de trabajo aproximadamente tres veces superior que el de un DTB para la misma capacidad de producción. Este hecho se acentúa en el caso del sulfato de amonio, donde la pequeña diferencia de densidades entre las aguas madres (aproximadamente 0,5 kg/l) implica velocidades de sedimentación de los cristales



pequeñas, resultando en una densidad del magma menor en el lecho de cristalizador OSLO.

En la actualidad, el mercado demanda mayoritariamente producto granulado, es por esta razón, que los productores que usan cristalizadores OSLO, han empezado a cuestionarse su decisión. Por ejemplo, una empresa americana importante como Honeywell, han modificado sus cristalizadores Oslo a DTB, aumentando así el tamaño de cristal de 1,2 mm a 2mm.

En la Tabla 11.5.1., se muestra una comparación entre un cristalizador DTB y un cristalizador OSLO.

Tabla 11.5.1.- Comparación entre un cristalizador DTB y un OSLO

	DTB	OSLO
Producción de sal (kg/h)	10000	10000
Sobresaturación (g/l)	1,80	1,8
ΔT (calentamiento externo) (°C)	8,0	1,3
Circulación externa (m³/h)	900	5600
Circulación interna (m³/h)	5600	5600
Velocidad en la zona de sedimentación (mm/s)	10	10
Superficie de sedimentación (m²)	25	154
Diámetro (m)	5,7	14,0



11.5.2. DTB-601 y DTB-602

En base a las explicaciones dadas en el apartado anterior, se ha decidido escoger el cristalizador DTB para el proceso, ya que producen más de 8,5 toneladas por hora de sulfato de amonio. Esta producción tan masiva no es adecuada para el FC, y más, si se quieren satisfacer las necesidades del mercado en cuanto a tamaño del cristal; y por otra banda, como ya se ha visto, los cristalizadores tipo Oslo están en desuso, principalmente por sus requerimientos de volumen.

En este proyecto, se ha decidido comprar este equipo, pero por tal de poder entender un poco mejor el funcionamiento de éste, se explicará de manera general, su funcionamiento y las ecuaciones por las que se rige.

El cristalizador DTB más simple se compone de dos funciones y dos regímenes distintos, tal y como se puede apreciar en la Figura 11.5.3. (el régimen en el que se da la cristalización y el régimen en el que se consigue la clarificación). La zona de cristalización se puede entender como un MSMPR (Mixed Suspension Mixed Particale Removal) en referencia a la cinética de cristalización. La zona de clarificación está destinada a quitar las partículas de un determinado tamaño del depósito de cristalización. Esto se consigue por salida por rebosadero, la cual arrastrará consigo las partículas de tamaño deseado, en contra de la decantación gravitatoria, a la vez que permite a las partículas de mayor tamaño permanecer en la zona de cristalización. La disposición de la salida por rebosadero del DTB es crítica en la operación del cristalizador. En algunos casos, el rebosadero se elimina de la operación de cristalización, funcionando sólo para aumentar la densidad del magma del cristalizador. En otros casos, la salida por rebosadero se recircula de nuevo al cristalizador DBT después de ser alterada química o térmicamente. El objetivo más común de dichas modificaciones es la “destrucción” (por ejemplo, produciéndose una disolución), de los cristales que salen por rebosadero. La salida tratada química o térmicamente, se recircula a la zona de cristalización del DTB, donde interviene en el proceso de precipitación, mediante el aumento de su sobresaturación. Esto tiene un efecto remarcable en el tamaño del cristal resultante y la distribución de tamaños de



los cristales finales: se dan cristales más grandes y menos distribución de tamaños de cristales.

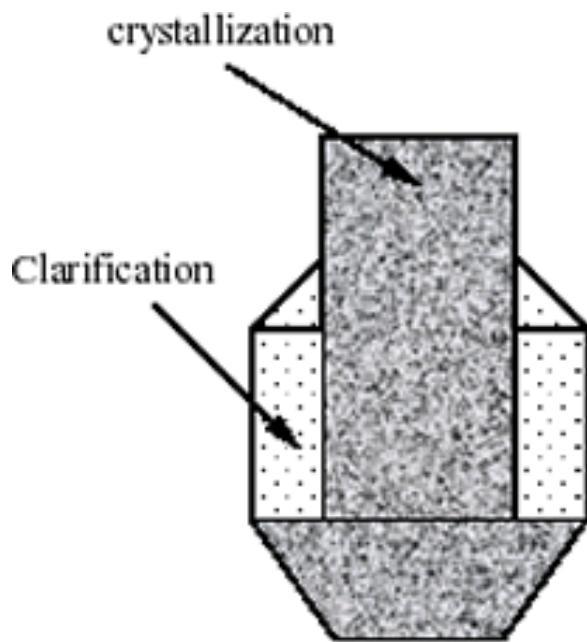


Figura 11.5.3.- Se observan las zonas de clarificación y cristalización. Éstas son las zonas por las que normalmente está compuesto un cristalizador de funcionamiento sencillo.

El DTB no altera las características cinéticas de un proceso de cristalización en particular. Estas características son la velocidad de crecimiento lineal (G , en m/s) y el ratio de nucleación ($B_0 \text{ l/m}^3\text{-s}$), así como los efectos de la nucleación secundaria, la sobresaturación, la densidad del magma, etc. Esto justifica poder usar los modelos de los cristalizadores MSMPR para obtener estos parámetros de manera más o menos rigurosa.



La habilidad de los DTB para operar a densidades de magma superiores a las normales mediante el aprovechamiento de su propio espesor, permite explotar cualquier influencia positiva que ésta pueda aportar al crecimiento de los cristales y la tasa de nucleación. Como resultado, mediante experimentos a pequeña escala, se puede determinar fácilmente la relación de MT-G, y Bo; después el DBT se diseña para conseguir estas condiciones específicas. En términos estrictamente teóricos, la función de clarificación del DTB, puede ser considerada equivalente a la de un hidrociclón, el cual elimina las aguas madres clarificadas de rebosadero, mientras que recircula la fase más pesada al MSMPR. Sin embargo, esta distribución presenta serias dificultades prácticas: un volumen considerable de aguas debería ser recirculado de la unidad MSMPR al hidrociclón, con además, una energía de entrada considerable. Esto degradaría el tamaño del cristal mediante la ruptura de los cristales recirculados y un aumento de la nucleación secundaria. Debido a que la abrasión de los cristales es muy difícil de determinar con antelación, sería imposible tenerla en cuenta en el diseño, y no se sabría hasta que no se opere a larga escala.

Como ya se ha dicho con anterioridad, los cristalizadores DTB tienen una distribución del tamaño de los cristales característica (CSD), la cual incluye información en el rendimiento de clarificación del Baffle. En comparación con la CSD de los MSMPR, el DTB muestra una distribución característica y diferente, con una indicación clara del tamaño máximo de partícula (LF) que es eliminada por el rebosadero de bafle.

Como una muestra sencilla de un DTB ya nos daría la información de la distribución de los tamaños de los cristales, el bafle se puede caracterizar directamente en cuanto a efectividad (LF) y clarificación (cantidad de cristales presentes en la salida por rebosadero). Será posible estimar también el efecto de las variaciones de la tasa de salida por rebosadero en el equilibrio de población de cristales en el DTB, o, de manera inversa, se podría estimar la tasa actual de salida por rebosadero de una unidad de operación a partir del equilibrio de población de cristales.



Una vez obtenida la formación justamente mencionada, sería posible calcular la distribución del tamaño de los cristales teórica para diferentes condiciones de operación: un cambio en la velocidad de la corriente de aguas madres limpias en el bafle cambiará el LF; un cambio en la cantidad de aguas madre expulsadas del cristalizador vía bafle cambiará tF. Ambas variables afectaran al tamaño del cristal (Randolph et al, 1973).

A pesar de todo, se ha decidido comprar el cristalizador. Este se ha obtenido a través de la empresa “HangZhou SemyaMachinery Co.Ltd”. Dicha empresa, para la cantidad de sulfato de amonio a cristalizar, ha recomendado purificar con dos DTB en paralelo. Las razones que ha argumentado la empresa, son principalmente, la garantía de tener un proceso en continuo en caso de fallada o mantenimiento de uno de los cristalizadores DTB; y también, que para las cantidades a producir, si no se hace en dos, puede resultar más difícil mantener un control del cristalizador DTB, y se puede producir apelmazamiento de los cristales y no obtener el tamaño deseado.

A parte de la cristalización, también es necesaria la centrifugación de la mezcla (F-601 y F-602). En esta operación unitaria, se obtendrán dos corrientes; una, que será la principal y continuará en el proceso, y otra, con las aguas madres, y que será recirculada al cristalizador. Entre ambas unidades, el cristalizador y el filtro centrífugo, habrá un tanque pulmón (T-601 y T-602) con el objetivo de facilitar la acumulación de líquidos. Todo este conjunto de equipos, es vendido en conjunto por dicha empresa.

La corriente de salida de la centrífuga, aún no tiene la pureza requerida; en otras palabras, el porcentaje de agua que contienen los cristales aún es demasiado elevado. Para conseguir las condiciones requeridas para la comercialización del sulfato de amonio, se hace necesaria la adquisición de un secador (D-601). Este evaporará el resto de agua que se necesita evaporar, y no tendrá ningún efecto sobre los cristales. Este secador, se ha obtenido también de una empresa, concretamente de FMC Link-Belt Roto-Louvre Dryers.

Como ya se ha dicho, los equipos necesarios para la purificación de sulfato de amonio no se han diseñado, pero en cambio, los equipos de intercambio de calor que se requieren para que funcionen estos equipos sí que se han diseñado (E-601, E-602 y E-603). El procedimiento seguido se puede seguir en detalle en el apartado 11.6. “Intercambiadores de calor”.

11. MANUAL DE CÁLCULO

CaprolacTeam, Caprolactam Industries



Los balances de materia de cada uno de los equipos presentes en la purificación del sulfato de amonio se pueden observar en la Tabla 11.5.2., 11.5.3., 11.5.4. y 11.5.5.

Tabla 11.5.2.-Balance de materia en DTB-601 y DTB-602

ENTRADA		SORTIDA	
602 (80°C,1ATM)	W(Kg/h)	603 (60°C,1ATM)	W(Kg/h)
CPL	11,45	CPL	11,45
(NH4)2SO4	4388,62	(NH4)2SO4	6478,44
H2O	7871,74	H2O	4599,61
subtotal	12271,80	subtotal	11089,49
606(40°C, 1ATM)	W(Kg/h)	609(130°C, 1ATM)	W(Kg/h)
CPL	0	H2O	7208
(NH4)2SO4	2089,82	subtotal	7208
H2O	3935,87	610(80°C, 1ATM)	W(Kg/h)
subtotal	6025,69	H2O	8853,2
H2O	8853,2	subtotal	8853,2
subtotal	8853,2	TOTAL	27150,69
TOTAL	27150,69		

Tabla 11.5.3.-Balance de materia en T-601 y T-602

ENTRADA		SORTIDA	
603 (60°C,1ATM)	W(Kg/h)	604 (60°C,1ATM)	W(Kg/h)
CPL	11,45	CPL	11,45
(NH4)2SO4	6478,44	(NH4)2SO4	6478,44
H2O	4599,61	H2O	4599,61
subtotal	11089,49	subtotal	11089,49
TOTAL	11089,49	TOTAL	11089,49



Tabla 11.5.4.-Balance de materia en F-601 y F-602

ENTRADA		SORTIDA	
604 (60°C,1ATM)	W(Kg/h)	605 (60°C,1ATM)	W(Kg/h)
CPL	11,45	CPL	11,45
(NH4)2SO4	6478,44	(NH4)2SO4	4388,62
H2O	4599,61	H2O	663,74
subtotal	11089,49	subtotal	5063,80
TOTAL	11089,49	606(40°C, 1ATM)	W(Kg/h)
		CPL	0
		(NH4)2SO4	2089,82
		H2O	3935,87
		subtotal	6025,69
		TOTAL	11089,49

Tabla 11.5.5.-Balance de materia en D-601

ENTRADA		SORTIDA	
605 (60°C,1ATM)	W(Kg/h)	608 (60°C,1ATM)	W(Kg/h)
CPL	11,45	(NH4)2SO4 (S)	4388,62
(NH4)2SO4	4388,62	H2O (s)	32,88
H2O	663,74	CPL (s)	11,45
subtotal	5063,80	subtotal	4432,95
TOTAL	5063,80	607(101°C, 1ATM)	W(Kg/h)
		H2O	630,86
		subtotal	630,86
		TOTAL	5063,80



11.6. TANQUES DE MEZCLA Y TANQUES DE PROCESO

11.6.1. TANQUE DE MEZCLA (T-201)

A continuación se detalla el procedimiento llevado a cabo para obtener el diseño mecánico del tanque de mezcla del área 200, el cual es alimentado mediante los tanques de almacenaje del área 100, además de la recirculación procedente de la purificación de la oxima. En este tanque se realiza la mezcla necesaria para la siguiente reacción de amoximación.

Para conocer el volumen del tanque de mezcla necesario, previamente es necesario tener noción del tiempo de mezcla, el caudal volumétrico entrante y el tiempo de residencia de este.

Mediante el caudal de recirculación de los diferentes compuesto, se pueden cuantificar los caudales necesarios de los tanques de almacenaje. En la siguiente tabla se muestran los caudales molares obtenidos de la recirculación:

Tabla 11.6.1.1.- Caudales molares de la recirculación

Corriente recirculado 204	
Compuesto	Caudal molar (Kmol/h)
NH ₃	47.45
tert-Butyl alcohol	231.19
H ₂ O	245.13
Ciclohexanona	1.19

De este modo se puede determinar el caudal necesario de los diferentes compuestos desde los tanques de almacenaje, ya que se conocen las relaciones molares que deben existir en el reactor. Los resultados que se obtienen son los siguientes:



Tabla 11.6.1.2.- Entrada a los tanques de almacenaje

Entradas de los Tanques de almacenaje	
Compuesto	n (Kmol/h)
NH ₃	56.59
H ₂ O + H ₂ O ₂	183.67
H ₂ O	2.82
Ciclohexanona	56.61

El tiempo de residencia supuesto para este corriente es de 0.5 h y el caudal de entrada es de $37.2 \frac{m^3}{h}$, de esta manera se obtiene un volumen de líquido de $18.6m^3$.

Para el diseño se ha especificado una fracción de gas de 0.2 y una fracción de líquido de 0.8. De este modo se obtiene un volumen de $24m^3$ para la parte cilíndrica del reactor.

Del mismo modo que en los siguientes diseños se ha estimado una relación altura diámetro de 1.5.

Así pues empleando la ecuación siguiente se obtiene el diámetro, el área cilíndrica y la altura, los resultados obtenidos se muestran en la tabla adjunta.

$$\frac{H}{D} = 1.5 \quad (\text{Ec. 11.6.1})$$

$$D = \left(\frac{V_{Tanque} \cdot 4}{1.5 \cdot \pi} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{Ec. 11.6.2})$$

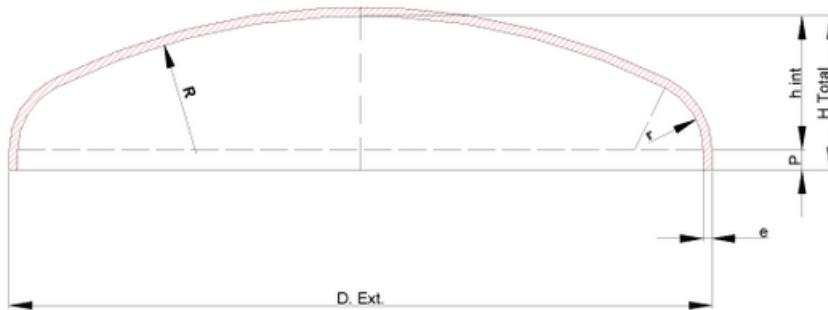
$$A_{circular} = \pi \cdot D \cdot H \quad (\text{Ec. 11.6.3.})$$



Tabla 11.6.1.3.- Dimensiones de la parte cilíndrica

Diámetro (m)	2.77
Altura (m)	4.15
A Cilindro (m ²)	36.12

El tanque de mezcla incorpora un cabezal y un fondo toriesférico el cálculo seguido para el diseño de estos ha sido extraído del manual de cálculo ASME.



La radios R y r corresponden al Diámetro del tanque y al 10% del diámetro del tanque respectivamente. De modo que los resultados obtenidos para los radios del toriesférico son $R=2.73$ m y $r=0.273$ m.

Aplicando las correlaciones mostradas en la siguiente tabla se consiguen las dimensiones del cabezal y el fondo.

Tabla 11.6.1.4.- Correlaciones para dimensionar los cabezales

Parámetro	Toriesférico ASME
Volumen	$0.08088 \cdot D^3$
Área	$0.931 \cdot D_0^2$
Altura	$0.169 \cdot D$



Los resultados obtenidos se muestran en la tabla adjunta.

Tabla 11.6.1.5.- Resultados del dimensionamiento

h toriesferico (m)	0,468
Vcabezal toriesférico (m ³)	1,717

Para determinar el volumen total y posteriormente la altura del líquido se debe efectuar el sumatorio de los volúmenes del cilindro y los cabezales tal y como muestra en la ecuación.

$$V_{Total} = V_{cilíndro} + V_{Cabezal} + V_{Fondo} = 28 \text{ m}^3 \text{ (Ec. 11.6.1.4.)}$$

De este modo se puede conseguir la altura del líquido en el interior del tanque, para ello se utilizan las mismas ecuaciones que en el apartado del diseño mecánico del reactor.

Los valores obtenidos se muestran a continuación:

Tabla 11.6.1.6.- Altura del líquido y del cilindro

hL cilindro	3,60
hLíquido Final	4,07

El conjunto de sobredimensionamiento, proporciona un sobredimensionamiento total de 13,73 respecto el volumen inicial.



Calculo del espesor del tanque

Parte cilíndrica

Para determinar el espesor que debe presentar la pared cilíndrica en las condiciones de operación, se debe conocer la presión que ejerce el fluido en el reactor. Para ello se utiliza la siguiente ecuación:

$$\Delta P_I = \rho_m \cdot g \cdot H_I \quad (\text{Ec. 11.6.1.5.})$$

El resultado obtenido es 0,3389 atm, seguidamente se determina la presión de diseño y se sobredimensiona un 15%:

$$P_{\text{diseño}} = \Delta P_{\text{líquido}} + P_{\text{Tanque}} + P_{\text{atm}} \quad (\text{Ec. 11.6.1.6.})$$

Aplicando la anterior ecuación se obtiene una presión de diseño de 2,69atm.

Una vez hallados todos los valores se aplica la ecuación que se muestra a continuación para determinar el espeso necesario.

$$t_{\text{cilíndro}} = \frac{P_d \cdot R}{S \cdot E - 0.6 \cdot P_d} + C_1 + C_2 \quad (\text{Ec. 11.6.1.7.})$$

Donde:



$t_{cilindro}$ → Grosor de la pared cilíndrica (m).

P_d → Presión de diseño (atm).

R → Radio del cuerpo cilíndrico.

s → Máxima tensión admisible (atm).

La tensión máxima admisible se extrae de la tabla del acero inoxidable AISI 304.

Tabla 11. 6.1. 8 Límite elástico del Acero AISI304 en función de la temperatura.

Acero Inoxidable AISI304	
Tensión máxima admisible	
T (°C)	atm
-28.89/37.78	1279.3
37.78	1279.3
93.33	1211.2
148.89	1129.6
204.44	1102.3
260	1081.9
315.56	1081.9
343.33	1081.9
371.11	1081.9
398.89	1054.7

Debido a que el tanque de mezcla se encuentra a 35,8 °C la tensión máxima admisible seleccionada es 1279,3.

$$\frac{2.689 \text{ atm} \cdot 1.36 \text{ m}}{1279.23 \text{ atm} \cdot 0.85 - 0.6 \cdot 2.689 \text{ atm}} + 0.001 \text{ m} + 0.0008 \text{ m} =$$

$$0.0057 \text{ m} \approx 6 \text{ mm}$$



Teniendo en cuenta el espesor sobredimensionado de **6mm**, se obtiene finalmente un diámetro exterior de **2.8 m**.

Cabezal Toriesférico

Del mismo modo que en el caso anterior se aplica la ecuación proporcionada por el código ASME, esta vez como se trata del cabezal superior, la columna de presión ejercida por el fluido no debe estar contemplada en el cálculo de la presión de diseño.

$$t_{\text{toriesférico}} = \frac{P_{d,c} \cdot M \cdot D_{\text{Tanque}}}{2 \cdot S \cdot E - 0.2 \cdot P_d} \quad (\text{Ec. 11.6.1.8.})$$

El valor de M ha sido extraído de la tabla que se muestra a continuación, donde L/r es 10 en este caso, ya que la relación de radios del cabezal torisférico es del 10% respecto el diámetro.

Tabla 11.6.1.8. Valores de M para el cálculo del cabezal torisférico.

VALUES OF FACTOR "M"																	
L/r	1.00	1.25	1.50	1.75	2.00	2.25	2.50	2.75	3.00	3.25	3.50	4.00	4.50	5.00	5.50	6.00	6.50
M	1.00	1.03	1.06	1.08	1.10	1.13	1.15	1.17	1.18	1.20	1.22	1.25	1.28	1.31	1.34	1.36	1.39
L/r	7.00		8.00		9.00		9.50		10.0		11.0		12.0		14.0		16.0
M	1.41	1.44	1.46	1.48	1.50	1.52	1.54	1.56	1.58	1.60	1.62	1.65	1.69	1.72	1.75	1.77	*
* THE MAXIMUM ALLOWED RATIO : $L = D + 2t$ (see note 2 on facing page)																	

Finalmente se obtiene el siguiente un grosor del cabezal $t_{\text{toricabezal}} = 0,049 \approx 0,05$

Fondo Toriesférico

Para calcular el grosor del fondo se aplica la misma ecuación que en el caso anterior pero utilizando la presión de diseño que tiene en cuenta la columna de líquido.



Así pues, efectuando este cálculo se llega a obtener un grosor de 14,5mm para el fondo toriesférico.

Peso del Reactor

El peso del reactor se calcula a partir del grosor y la superficie que ocupa cada componente que conforma el recipiente del reactor.

Peso del fondo toriesférico

Para realizar el cálculo del peso del fondo primeramente se debe calcular el volumen que ocupa el grosor del fondo toriesférico, para ello se aplica la siguiente fórmula:

$$V_{Fondo} = 0.08089 \cdot (D_{Tanque} + t_{Fondo})^3 - 0.08089 \cdot (D_{Tanque})^3 \quad (\text{Ec. 11.6.1.9.})$$

Se obtiene finalmente un volumen de **0.011 m³**, de modo que conociendo la densidad del Acero AISI-304L, **8030 $\frac{Kg}{m^3}$** , se obtiene un peso de **89,63 Kg**.

Peso del cabezal toriesférico

El cálculo llevado a cabo para conseguir el peso del cabezal toriesférico consiste en el mismo procedimiento anteriormente expuesto para el cálculo del fondo, esto es así debido a que las dos partes comparten la misma simetría.

$$V_{Cabezal} = 0.08089 \cdot (D_{Tanque} + t_{Cabezal})^3 - 0.08089 \cdot (D_{Tanque})^3$$

Para el cabezal se obtiene un volumen de **0.009 m³** y consecuentemente un peso de **71.6 Kg**.



Peso del cuerpo cilíndrico del tanque

El cálculo del peso de la parte cilíndrica del tanque de mezcla difiere ligeramente del cálculo de las anteriores partes del reactor ya que la geometría de este es diferente.

A continuación se muestra la ecuación utilizada para determinar el peso:

$$P_{cil} = \pi \cdot D \cdot H_{cil} \cdot t_{cil} \cdot \rho_{Acero} \quad (Ec. 11.6.1.10.)$$

$$P_{cil} = 1693.5 \text{ Kg}$$

Peso del reactor vacío

Una vez se han hallado los pesos de las diferentes partes del reactor se procede a determinar el peso del equipo vacío, para ello eso se hace uso de la ecuación siguiente:

$$P_{Reactor} = P_{Cabeza} + P_{Fondo} + P_{Cilindro} \quad (Ec. 11.6.1.11.)$$

El sumatorio de los diferentes pesos proporciona el peso total del reactor cuando se encuentra vacío, el valor alcanzado es de **1854.78 Kg**, esto equivale a **1.85 toneladas**.

Una vez conseguido el peso vacío, se estima el peso presentado por el reactor cuando se encuentra en operación, para ello se utiliza la densidad de la mezcla y el volumen ocupado por ella.

$$P_{Mezcla} = \rho_{Mezcla} \cdot V_{mezcla} \quad (Ec. 11.6.1.12)$$

$$870.7 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} \cdot 18.6 \text{ m}^3 = 16199 \text{ Kg}$$

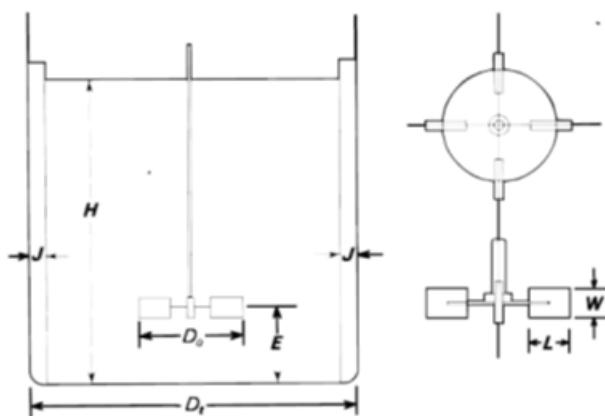


Efectuando el sumatorio entre el peso del reactor vacío y la mezcla que contiene, se estima el peso del reactor en operación, otorgando así un valor de **18054.15 Kg**, en otras palabras **18.054 Tn**.

11.6.2. Diseño mecánico del agitador

En el tanque de mezcla se consigue un medio homogéneo mediante la agitación para ello se debe mantener un régimen turbulento en el reactor. Para lograr este objetivo se introduce en el reactor un **agitador de turbina de 6 palas**.

El diseño del agitador se realiza en base al diámetro del tanque tal y como se muestra en la siguiente figura:



$$\begin{aligned}
 S_1 &= \frac{D_a}{D_t} = \frac{1}{3} & S_6 &= \frac{H}{D_t} = 1 & S_5 &= \frac{J}{D_t} = \frac{1}{12} \\
 S_2 &= \frac{E}{D_a} = 1 & S_4 &= \frac{W}{D_a} = \frac{1}{5} & S_3 &= \frac{L}{D_a} = \frac{1}{4}
 \end{aligned}$$

Figura 11. 2. 3 Relaciones para el diseño del agitador.

Los resultados obtenidos de la aplicación de este conjunto de relaciones se presentan en la tabla siguiente:



Tabla 11. 6 .2.1 Valores obtenidos para el dimensionamiento del agitador.

Indicación Gráfica	Relación	Valor (m)
S1(0.33)	Da/Dt=1/3	0.91
S2(1)	E/Da=1	0.91
S3 (0.25)	L/Da=1/4	0.23
S4 (0.20)	W/Da=1/5	0.18
S5(0.083)	J/Dt=1/12	0.23
S6(1)	H/Dt=1	2.73

Una vez especificadas las dimensiones de las diferentes partes que constituyen el agitador, se realiza el cálculo de potencia necesaria para poder homogenizar la mezcla.

Para ello inicialmente es necesario calcular el número de Reynolds.

$$Re = \frac{\rho \cdot n \cdot D_a^2}{\mu} = \frac{870.7 \frac{Kg}{m^3} \cdot 3 \frac{rev}{s} \cdot (0,91 m)^2}{0.0006447 \frac{Kg}{m \cdot s}} = 3.36 \cdot 10^6$$

(Ec. 11. 6. 2. 1)

Donde:

ρ → Densidad de la mezcla ($\frac{Kg}{m^3}$).

n → Número de revoluciones por segundo del agitador (rps)

D_a → Diámetro de la pala (m).

μ → Viscosidad de la mezcla ($\frac{Kg}{m \cdot s}$).



Se puede apreciar que el Reynolds obtenido es superior a 10^5 hecho que indica que el régimen de circulación es turbulento y por consiguiente la mezcla está bien homogeneizada. Para hallar el número de potencia se utiliza la siguiente gráfica, donde se encuentra el número de potencia relacionado con el número de Reynolds.

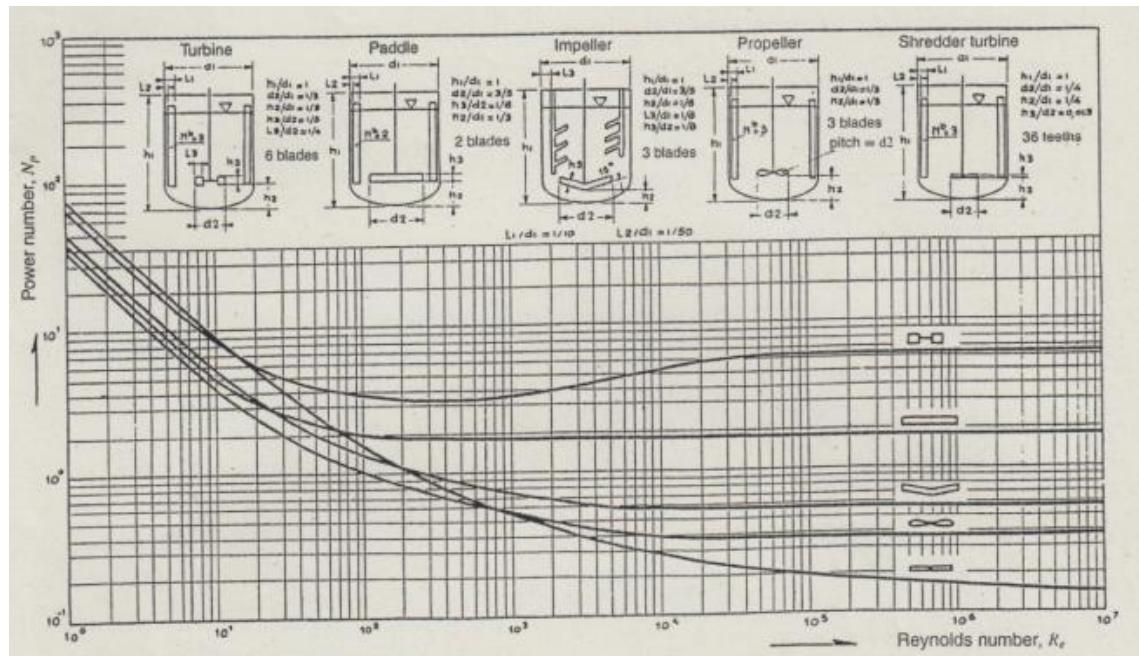


Figura 11. 2. 4 Curvas para el cálculo de potencia en función del Reynolds y del tipo de agitador.

Se observa que a un Reynolds superior de 10^5 , la turbina de palas adquiere un número de potencia de 5.

$$P = \frac{D_a^5 \cdot N_p \cdot n^3 \cdot \rho_{Mezcla}}{g} \quad (Ec. 11. 6. 2. 2)$$

$$7492.79 \text{ W} \approx 7,5 \text{ KW}$$



Para determinar si el valor es coherente se calcula la potencia entre el volumen y se compara con los valores estándares de la tabla que se muestra a continuación.

$$\frac{P}{V_I} = \frac{7,5 \text{ KW}}{18,6 \text{ m}^3} = 0.402$$

Agitation	Applications	Power, kW/m ³
Mild	Blending, mixing	0.04–0.10
	Homogeneous reactions	0.01–0.03
Medium	Heat transfer	0.03–1.0
	Liquid-liquid mixing	1.0–1.5
Severe	Slurry suspension	1.5–2.0
	Gas absorption,	1.5–2.0
	Emulsions	1.5–2.0
Violent	Fine slurry suspension	> 2.0

Figura 11. 2. 5 Estándares de las relaciones de potencia/volumen para las diferentes mezclas

El coeficiente de mezcla puede situarse entre el rango de mezcla transferencia de calor entre una mezcla líquido, este hecho corrobora la validación del diseño del agitador ya que se trata de un sistema con las características ayudas en la tabla.

Aislamiento

Cabe destacar, que debido a que el tanque de mezcla se encuentra sobre los 35°C aproximadamente, este equipo no precisa de una camisa de aislamiento, ya que la temperatura de la superficie se encuentra entre los valores máximos y mínimos permitidos por las regulaciones jurídicas.



11.6.3 TANQUES DE PROCESO PARA HACER EL VACÍO (T-202 Y T-203)

Hay varias columnas del Área 200 que operan en condiciones de presión baja. Para conseguir que el proceso funcione y evitar problemas de operación, se ha diseñado un sistema de tanques alternos en los cuales se hará el vacío, y no directamente en el condensador.

Diseño funcional

Sabiendo el caudal (23,37 m³/h), se calcula el volumen de los tanques teniendo en cuenta que el tiempo de residencia del fluido en el tanque será de 30 minutos.

$$V_{útil} = Q_l \cdot t_{residencia} \quad (\text{Ec. 11.6.3.1})$$

Se obtiene un volumen de 27,77 m³.

De forma general, se suele considerar que la altura del reactor sea unas 2 veces más grande que el diámetro del reactor. Partiendo de esta suposición, y resolviendo el sistema de ecuaciones formado por las ecuaciones 11.6.3.2 y 11.6.3.3, se encuentra el valor del diámetro interno y la altura del tanque.

$$H_{cilindro} = 2 \cdot D_{cilindro} \quad (\text{Ec. 11.6.3.2})$$

$$V_{cilindro} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{cilindro}^2 \cdot H_{cilindro} = 21 \text{ m}^3 \quad (\text{Ec. 11.6.3.3})$$

Se obtiene de esta manera una altura del cilindro de 4,13 m y diámetro de 2,07 m.

Diseño mecánico



Se realiza el diseño mecánico de la misma manera que en el apartado 11.x.x., los resultados se puede observar en la Tabla 11.6.3.1., Tabla 11.6.3.2. y Tabla 11.6.3.3.

Tabla 11.6.3.1- Parámetros para el diseño mecánico de los tanques T-202 y T-203

P absoluta de operación (atm)	1
P de diseño (atm)	2
E	0,85
S (atm)	1061,52
ρ fluido (kg/m³)	821,08

Tabla 11.6.3.2.- Espesor de la parte cilíndrica, del cabezal y del fondo toriesférico de los tanques T-202 y T-203

t cilindro (mm)	2,50→3
t cabezal (mm)	2,50→3
ΔP (atm)	0,3280
P para el espesor del fondo (atm)	2,33
t fondo (mm)	2,50→3

Tabla 11.6.3.3.- Dimensiones de los tanques T-202 y T-203

11. MANUAL DE CÁLCULO

CaprolacTeam, Caprolactam Industries



h1 cabezal (m)	0,0105
h2 cabezal (m)	0,3992
h3 cabezal (m)	0,4097
V cabezal (m)	0,7175
h1 fondo (m)	0,0105
h2 fondo (m)	0,3992
h3 fondo (m)	0,4097
V fondo (m)	0,7175
V total tanque (m)	15,30
H total tanque (m)	4,95
D total tanque (m)	2,08



Peso total de los tanques

Para calcular el peso de los tanques se ha seguido el procedimiento de los resultados se pueden observar en la Tabla 11.6.3.4.

Tabla 11.6.3.4.- Pesos de los tanques T-202 y T-203

ρ AISI 304-L (kg/m ³)	8030
P cilindro (Kg)	6470,04
P cabezal (Kg)	162,61
P fondo (Kg)	162,61
P vacío (Kg)	6795,27
P operación (Kg)	18179,54
P agua (kg)	20660,27

Aislante

Como el fluido contenido en estos tanques se encuentra a una temperatura de 39,72 °C, no se requiere aislante.

11.6.4 TANQUES DE PROCESO PARA HACER EL VACÍO (T-204 Y T-205)

Hay varias columnas del Área 200 que operan en condiciones de presión baja. Para conseguir que el proceso funcione y evitar problemas de operación, se ha diseñado un sistema de tanques alternos en los cuales se hará el vacío, y no directamente en el condensador.

Diseño funcional



Sabiendo el caudal, se calcula el volumen de los tanques teniendo en cuenta que el tiempo de residencia del fluido en el tanque será de 30 minutos.

$$V_{\text{útil}} = Q_l \cdot t_{\text{residencia}} \quad (\text{Ec. 11.6.4.1})$$

Se obtiene un volumen de 9,02 m³.

De forma general, se suele considerar que la altura del reactor sea unas 2 veces más grande que el diámetro del reactor. Partiendo de esta suposición, y resolviendo el sistema de ecuaciones formado por las ecuaciones 11.6.4.2 y 11.6.4.3, se encuentra el valor del diámetro interno y la altura del tanque.

$$H_{\text{cilindro}} = 2 \cdot D_{\text{cilindro}} \quad (\text{Ec. 11.6.4.2})$$

$$V_{\text{cilindro}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{cilindro}}^2 \cdot H_{\text{cilindro}} = 21 \text{ m}^3 \quad (\text{Ec. 11.6.4.3})$$

Se obtiene de esta manera una altura del cilindro de 4,5 m y diámetro de 2,3 m.



Diseño mecánico

Se realiza el diseño mecánico de la misma manera que en el apartado 11.x.x., los resultados se puede observar en la Tabla 11.6.4.1., Tabla 11.6.4.2. y Tabla 11.6.4.3.

Tabla 11.6.4.1.- Parámetros para el diseño mecánico de los tanques T-204 y T-205

P absoluta de operación (atm)	0,1
P de diseño (atm)	1,1
E	0,85
S (atm)	1061,52
ρ fluido (kg/m³)	862,41

Tabla 11.6.4.2.- Espesor de la parte cilíndrica, del cabezal y del fondo toriesférico de los tanques T-204 y T-205

t cilindro (mm)	2,50→3
t cabezal (mm)	2,50→3
ΔP (atm)	0,3753
P para el espesor del fondo (atm)	1,48
t fondo (mm)	2,50→3

**Tabla 11.6.4.3.- Dimensiones de los tanques T-204 y T-205**

h1 cabezal (m)	0,0105
h2 cabezal (m)	0,4437
h3 cabezal (m)	0,4542
V cabezal (m)	0,9842
h1 fondo (m)	0,0105
h2 fondo (m)	0,4437
h3 fondo (m)	0,4542
V fondo (m)	0,9841
V total tanque (m)	10,99
H total tanque (m)	5,41

Peso total de los tanques

Para calcular el peso de los tanques se ha seguido el procedimiento del anterior, los resultados se pueden observar en la Tabla 11.6.4.4.

**Tabla 11.6.4.4.- Pesos de los tanques T-204 y T-205**

ρ AISI 304-L (kg/m ³)	8030
P cilindro (Kg)	7832,98
P cabezal (Kg)	200,70
P fondo (Kg)	200,70
P vacío (Kg)	8234,38
P operación (Kg)	16013,32
P agua (kg)	17254,38

Aislante

Como el fluido contenido en estos tanques se encuentra a una temperatura de 32°C, no se requiere aislante.

11.6.5 TANQUE DE PROCESO O TANQUE ACUMULADOR (T-304)

Para garantizar un control de cabal adecuado, y prevenir problemas, se diseña un tanque de acumulación de ciclohexanona oxima (T-304) previo a la entrada de los reactores del “Beckmann Rearrangement” (R301, R-302 y R-303).



Diseño funcional

Sabiendo el caudal volumétrico ($6,76 \text{ m}^3/\text{h}$), se calcula el volumen de los tanques teniendo en cuenta que el tiempo de residencia del fluido en el tanque será de 4 horas.

$$V_{\text{útil}} = Q_l \cdot t_{\text{residencia}} \quad (\text{Ec. 11.6.5.1})$$

Substituyendo se obtiene un volumen útil de $27,04 \text{ m}^3$.

De forma general, se suele considerar que la altura del reactor sea unas 2 veces más grande que el diámetro del reactor. Partiendo de esta suposición, y resolviendo el sistema de ecuaciones formado por las ecuaciones 11.6.5.2 y 11.6.5.3, se encuentra el valor del diámetro interno y la altura del tanque.

$$H_{\text{cilindro}} = 2 \cdot D_{\text{cilindro}} \quad (\text{Ec. 11.6.5.2})$$

$$V_{\text{cilindro}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{cilindro}}^2 \cdot H_{\text{cilindro}} = 27,04 \text{ m}^3 \quad (\text{Ec. 11.6.5.3})$$

Se obtiene de esta manera una altura del cilindro de 5,2 m y diámetro de 2,6

Los tanques de acumulación tendrán un cabezal semiesférico y un fondo plano. Como se conoce el diámetro del tanque, y este será igual al del cabezal, se puede calcular el volumen de este:

$$V_{\text{cabezal}} = \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot r^3 = \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot 2,6^3 = 4,6 \text{ m}^3$$



De esta forma, el volumen total del tanque será:

$$V_{tanque} = V_{cilindro} + V_{cabeza} = 4,60 + 27,04 = 31,64 \text{ m}^3 (\text{Ec. 11.6.5.4})$$

Por otra banda, asumiendo que la proporción de la altura del cabezal con el diámetro del tanque debe ser la mitad, el cabezal tendrá una altura de 1,3 metros. Como consecuencia, la altura total del tanque será:

$$h_{tanque} = h_{cabeza} + h_{cilindro} = 1,3 \text{ m} + 5,2 \text{ m} = 6,5 \text{ m}$$

En la Tabla 11.6.5.1., se pueden observar los volúmenes y alturas del cabezal, parte cilíndrica y tanque.

Tabla 11.6.5.1.- Resultados del diseño funcional del T-304

<i>H cilindro (m)</i>	5,2
<i>D tanque (m)</i>	2,6
<i>V cabezal (m)</i>	4,60
<i>V tanque (m)</i>	31,64
<i>H cabezal (m)</i>	1,3
<i>H tanque (m)</i>	6,5

Diseño mecánico



Se ha seguido el mismo procedimiento que en el apartado 11.1.2.6 para determinar los espesores que se pueden observar en la Tabla 11.6.5.2.

Tabla 11.6.5.2.- Resultados del diseño mecánico del T-304

P operación (atm)	1
P diseño (atm)	2
E	0,85
S (atm)	1061,52
ρ fluido (kg/m³)	948
ΔP (atm)	0,4768
P para el espesor (atm)	2,48
t cilindro (mm)	2,50→3
t cabezal (mm)	2,50→3
t fondo (mm)	8

Peso del tanque

Se calcula el peso del tanque de la misma manera que en el apartado 11.1.2.10.; los resultados se pueden observar en la Tabla 11.6.5.3.

Tabla 11.6.5.3.- Pesos de los tanques T-304

ρ AISI 304-L (kg/m³)	8030
P cilindro (Kg)	10232,07



P cabezal (Kg)	256,40
P fondo (Kg)	341,07
P vacío (Kg)	10829,53
P operación (Kg)	3463,45
P agua (kg)	37869,53

Aislante

El tanque requiere aislante, ya que el fluido de proceso se encuentra a una temperatura de 90°C. Igual que en casos anteriores, se utilizará lana de roca, y para diseñarlo se utilizará el programa calorcol. En la Figura 11.6.5.1, se muestra una captura de los resultados.

11.6.6 TANQUE DE MEZCLA (T-401)

A continuación se presentan todos los resultados obtenidos en el diseño del tanque T-401 de la zona de neutralización, el procedimiento seguido ha sido el mismo que se ha llevado a cabo para el tanque T-201.

Dimensiones del tanque

Tabla 11.6.6.1 Característica del reactor

τ (h)	1,00
Q(m ³ /h)	21,94
VI (m ³)	21,94
H/d	1,50
εL	0,90



εG	0,10
V con gas (m ³)	25,00
d	2,77
Área cilindro (m ²)	36,12
h (m)	4,15

Características de los cabezales y volumen final

Tabla 11.6.6.2 Característica del tanque

h toriesferico (m)	0,47
h total	5,09
Vcabezal toriesfereico	1,72
hLiquido Final	4,30
Vtotal final (m ³)	28,00
Sobredimensionamiento %	11,24

Presiones del sistema para el cálculo del grosor

Tabla 11.6.6.3 Característica del tanque

P diseño (atm)	2,22
Pd sobredimensionada 15%	2,55
P (atm) Mescla	1,00
T (°C)	23,84
ρMezcla (Kg/m ³)	996,94
ΔP(pa)	22000,95



Especificaciones de los grosores

Tabla 11.6.6.4 Característica del tanque

tcil(grosor cilindro mm)	6
D tanc ext (m)	2,8
t fondo (mm)	6,2
t cabezal (mm)	4,9

Peso del reactor en operación y en pruebas

Tabla 11.6.6.5 Característica del tanque

ρ acero AISI 304L (Kg/m3)	8030,00
Peso del fondo (Kg)	88,50
Peso del cabezal (Kg)	74,59
V fondo (m2)	0,01
Volumen cabezal	0,01
Peso cilindro	1740,26
P tanque (Kg)	1903,35
P mezcla (Kg)	17425,86
Peso Tanque en operación	19329,20
ρ H2O	1000,00
P mezcla (Kg)	21940,00
Peso pruebas con agua	23843,35



Características agitador

Tabla 11.6.6.6 Característica del tanque

da/dt=1/3	0,91
E/da=1	0,91
L/da=1/4	0,23
w/da=1/5	0,18
j/dt=1/12	0,23
h/dt=1	2,73

Tabla 11.6.6.7 Característica del tanque

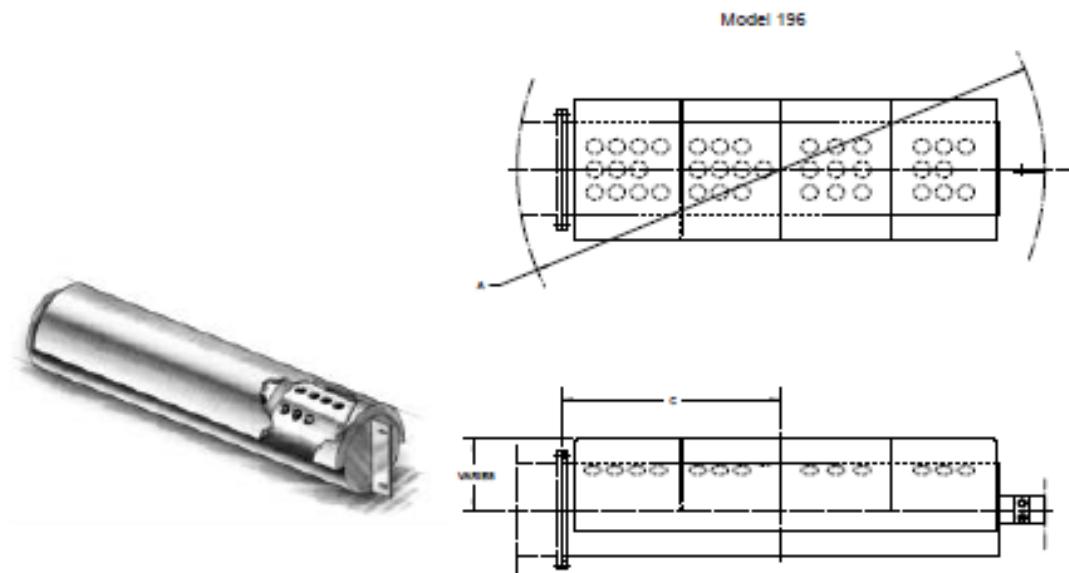
Velocidad agitador (rpm)	3,00
Tiempo de mezcla (s)	6,91
Re	3356404,61
P(w)	7492,80
P (Kw)	7,49
P/Vl	0,40

Determinación del difusor para la entrada del Amoníaco

El tanque de mezcla T-401 incorpora un difusor en el fondo del tanque, el difusor tiene la función conducir el reactivo $NH_3(g)$ a través del tanque. La introducción de un difusor en el sistema garantiza una buena distribución homogénea del gas sobre la solución, de este modo se asegura que el amoniaco se disolverá en el medio.



Para llevara a cabo este fin se ha escogido un difusor modelo 196 de la casa Saint-Gobain NorPro, los detalles de este tipo de difusor se muestran en la siguiente figura.



Aislamiento

El tanque de mezcla T-401, se encuentra a una temperatura de 23,84 °C, de este modo no es necesario incorporar una manta aislante para reducir la temperatura superficial, ya que esta se encuentra dentro delos límites de seguridad.

11.6.7 TANQUES DE PROCESO O TANQUES ACUMULADORES (T-501 Y T-502)

Para garantizar un control del reflujo cabal adecuado, y prevenir problemas, se diseña un tanque de acumulación de la salida del condensador total de las columnas de destilación para la purificación de la caprolactama (C-502 y C-503).

Diseño funcional



Sabiendo el caudal volumétrico (70,86 m³/h), se calcula el volumen de los tanques teniendo en cuenta que el tiempo de residencia del fluido en el tanque será de 4 horas.

$$V_{\text{útil}} = Q_l \cdot t_{\text{residencia}} \quad (\text{Ec. 11.6.7.1})$$

Substituyendo se obtiene un volumen útil de 141,72 m³.

De forma general, se suele considerar que la altura del reactor sea unas 2 veces más grande que el diámetro del reactor. Partiendo de esta suposición, y resolviendo el sistema de ecuaciones formado por las ecuaciones 11.6.7.1 y 11.6.7.5, se encuentra el valor del diámetro interno y la altura del tanque.

$$H_{\text{cilindro}} = 2 \cdot D_{\text{cilindro}} \quad (\text{Ec. 11.6.7.2})$$

$$V_{\text{cilindro}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{cilindro}}^2 \cdot H_{\text{cilindro}} = 141,72 \text{ m}^3 \quad (\text{Ec. 11.6.7.3})$$

Se obtiene de esta manera una altura del cilindro de 8,97 m y diámetro de 4,49 m.

Los tanques de acumulación tendrán un cabezal semiesférico y un fondo plano. Como se conoce el diámetro del tanque, y este será igual al del cabezal, se puede calcular el volumen de este:



$$V_{cabezal} = \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot r^3 = \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot (4,49/2)^3 = 23,70 \text{ m}^3 \quad (\text{Ec. 11.6.7.4})$$

De esta forma, el volumen total del tanque será:

$$V_{tanque} = V_{cilindro} + V_{cabezal} = 141,72 + 23,70 = 165,42 \text{ m}^3 \quad (\text{Ec. 11.6.7.5})$$

Por otra banda, asumiendo que la proporción de la altura del cabezal con el diámetro del tanque debe ser la mitad, el cabezal tendrá una altura de 1,3 metros. Como consecuencia, la altura total del tanque será:

$$h_{tanque} = h_{cabezal} + h_{cilindro} = 2,25 \text{ m} + 8,97 \text{ m} = 11,22 \text{ m}$$

(Ec. 11.6.7.6)

En la Tabla 11.6.6.1., se pueden observar los volúmenes y alturas del cabezal, parte cilíndrica y tanque.

Tabla 11.6.6.1.- Resultados del diseño funcional del T-501 y T-502

H cilindro (m)	8,97
D tanque (m)	4,49
V cabezal (m)	23,70
V tanque (m³)	165,42
H cabezal (m)	2,25
H tanque (m)	11,22



Diseño mecánico

Se ha seguido el mismo procedimiento que en el apartado 11.1.2.6 para determinar los espesores que se pueden observar en la Tabla 11.6.6.2.

Tabla 11.6.6.2.- Resultados del diseño mecánico del T-501 y T-502

P operación (atm)	1
P diseño (atm)	2
E	0,85
S (atm)	1061,52
ρ fluido (kg/m³)	889,1
ΔP (atm)	0,7714
P para el espesor (atm)	2,7714
t cilindro (mm)	2,51→3
t cabezal (mm)	2,50→3
t fondo (mm)	8

Peso del tanque

Se calcula el peso del tanque de la misma manera que en el apartado 11.1.2.10.; los resultados se pueden observar en la Tabla 11.6.4.3.

**Tabla 11.6.6.3.- Pesos de los tanques T-501 y T-502**

ρ AISI 304-L (kg/m ³)	8030
P cilindro (Kg)	30480,74
P cabezal (Kg)	763,89
P fondo (Kg)	1017,16
P vacío (Kg)	32261,78
P operación (Kg)	158265,03
P agua (kg)	173981,78

Aislante

El tanque no requiere aislante, ya que el fluido de proceso se encuentra a una temperatura de 9°C.

11.6.8 TANQUES DE PROCESO PARA HACER EL VACÍO (T-504 Y T-505)

Hay varias columnas del Área 200 que operan en condiciones de presión baja. Para conseguir que el proceso funcione y evitar problemas de operación, se ha diseñado un sistema de tanques alternos en los cuales se hará el vacío, y no directamente en el condensador.



Diseño funcional

Sabiendo el caudal volumétrico (78,73 m³/h), se calcula el volumen de los tanques teniendo en cuenta que el tiempo de residencia del fluido en el tanque será de 30 minutos.

$$V_{\text{útil}} = Q_l \cdot t_{\text{residencia}} \quad (\text{Ec. 11.6.8.1})$$

Substituyendo se encuentra un volumen útil de 39,37 m³.

De forma general, se suele considerar que la altura del reactor sea unas 2 veces más grande que el diámetro del reactor. Partiendo de esta suposición, y resolviendo el sistema de ecuaciones formado por las ecuaciones 11.6.8.1 y 11.6.8.2, se encuentra el valor del diámetro interno y la altura del tanque.

$$H_{\text{cilindro}} = 2 \cdot D_{\text{cilindro}} \quad (\text{Ec. 11.6.8.1})$$

$$V_{\text{cilindro}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{cilindro}}^2 \cdot H_{\text{cilindro}} = 21 \text{ m}^3 \quad (\text{Ec. 11.6.8.2})$$

Se obtiene de esta manera una altura del cilindro de 6 m y diámetro de 3 m.

Diseño mecánico

Se realiza el diseño mecánico de la misma manera que en el apartado 11.x.x., los resultados se puede observar en la Tabla 11.6.7.1.., Tabla 11.6.7.2. y Tabla 11.6.7.3.



Tabla 11.6.8.1.- Parámetros para el diseño mecánico de los tanques T-504 y T-505

P absoluta de operación (atm)	1
P de diseño (atm)	2
E	0,85
S (atm)	1061,52
ρ fluido (kg/m ³)	889,52

Tabla 11.6.8.2.- Espesor de la parte cilíndrica, del cabezal y del fondo toriesférico de los tanques T-504 y T-505

t cilindro (mm)	2,50→3
t cabezal (mm)	2,50→3
ΔP (atm)	0,51597
P para el espesor del fondo (atm)	2,5197
t fondo (mm)	2,50→3

Tabla 11.6.8.3.- Dimensiones de los tanques T-504 y T-505

h1 cabezal (m)	0,0105
h2 cabezal (m)	0,5791
h3 cabezal (m)	0,5896
V cabezal (m)	2,18



h1 fondo (m)	0,0105
h2 fondo (m)	0,5791
h3 fondo (m)	0,5896
V fondo (m)	2,18
V total tanque (m³)	43,73
H total tanque (m)	7,18

Peso total de los tanques

Para calcular el peso de los tanques se ha seguido el procedimiento anterior, los resultados se pueden observar en la Tabla 11.6.8.5.

Tabla 11.6.8.5.- Pesos de los tanques T-504 y T-505

ρ AISI 304-L (kg/m³)	8030
P cilindro (Kg)	13622,57
P cabezal (Kg)	341,25
P fondo (Kg)	341,25
P vacío (Kg)	14305,07
P operación (Kg)	49305,67
P agua (kg)	53670,07



11.6.9 TANQUE DE PROCESO O TANQUE ACUMULADOR (T-503)

Para evitar problemas de funcionamiento en la escamadora, o no perder la caprolactama en caso de que éste se averíe, se diseña un tanque acumulador (T-503).

11.6.9.1 Diseño funcional

Sabiendo el caudal volumétrico ($6,3 \text{ m}^3/\text{h}$), se calcula el volumen de los tanques teniendo en cuenta que el tiempo de residencia del fluido en el tanque será de 8 horas.

$$V_{\text{útil}} = Q_l \cdot t_{\text{residencia}} \quad (\text{Ec. 11.6.9.1})$$

Substituyendo se obtiene un volumen útil de $50,4 \text{ m}^3$.

De forma general, se suele considerar que la altura del reactor sea unas 2 veces más grande que el diámetro del reactor. Partiendo de esta suposición, y resolviendo el sistema de ecuaciones formado por las ecuaciones 11.6.9.1 y 11.6.9.3, se encuentra el valor del diámetro interno y la altura del tanque.

$$H_{\text{cilindro}} = 2 \cdot D_{\text{cilindro}} \quad (\text{Ec. 11.6.9.2})$$

$$V_{\text{cilindro}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{cilindro}}^2 \cdot H_{\text{cilindro}} = 50,4 \text{ m}^3 \quad (\text{Ec. 11.6.9.3})$$

Se obtiene de esta manera una altura del cilindro de 6,36 m y diámetro de 3,12 m.



11. MANUAL DE CÁLCULO

CaprolacTeam, Caprolactam Industries

Los tanques de acumulación tendrán un cabezal semiesférico y un fondo plano. Como se conoce el diámetro del tanque, y este será igual al del cabezal, se puede calcular el volumen de este:

$$V_{cabezal} = \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot r^3 = \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot (3,12/2)^3 = 7,95 \text{ m}^3 (\text{Ec. 11.6.9.4})$$

De esta forma, el volumen total del tanque será:

$$V_{tanque} = V_{cilindro} + V_{cabezal} = 50,4 + 7,95 = 58,35 \text{ m}^3 (\text{Ec. 11.6.9.5})$$

Por otra banda, asumiendo que la proporción de la altura del cabezal con el diámetro del tanque debe ser la mitad, el cabezal tendrá una altura de 1,56 metros. Como consecuencia, la altura total del tanque será:

$$h_{tanque} = h_{cabezal} + h_{cilindro} = 1,56 \text{ m} + 6,36 \text{ m} = 7,92 \text{ m} (\text{Ec. 11.6.9.6})$$

En la Tabla 11.6.9.1., se pueden observar los volúmenes y alturas del cabezal, parte cilíndrica y tanque.



Tabla 11.6.9.1.- Resultados del diseño funcional del T-503

H cilindro (m)	6,36
D tanque (m)	3,12
V cabezal (m)	7,95
V tanque (m)	58,35
H cabezal (m)	1,56
H tanque (m)	7,92

11.6.9.2 Diseño mecánico

Se ha seguido el mismo procedimiento que en el apartado anterior para determinar los espesores que se pueden observar en la Tabla 11.6.8.2.

Tabla 11.6.8.2.- Resultados del diseño mecánico del T-503

P operación (atm)	1
P diseño (atm)	2
E	0,85
S (atm)	1061,52
ρ fluido (kg/m³)	1110,4
ΔP (atm)	0,6830
P para el espesor (atm)	2,6830



t cilindro (mm)	2,51→3
t cabezal (mm)	2,50→3
t fondo (mm)	8

11.6.9.3 Peso del tanque

Se calcula el peso del tanque de la misma manera que en el apartado 11.1.2.10.; los resultados se pueden observar en la Tabla 11.6.8.3.

Tabla 11.6.8.3.- Pesos de los tanques T-503

ρ AISI 304-L (kg/m³)	8030
P cilindro (Kg)	15017,53
P cabezal (Kg)	369,06
P fondo (Kg)	491,14
P vacío (Kg)	15877,73
P operación (Kg)	71841,89
P agua (kg)	66277,73

11.6.9.4 Aislante

El tanque requiere aislante, ya que el fluido de proceso se encuentra a una temperatura de 80°C. Igual que en casos anteriores, se utilizará lana de roca, y para diseñarlo se utilizará el programa calorcol. En la Figura 11.6.8.1, se muestra una captura de los resultados.



11.7 INTERCAMBIADORES DE CALOR

La presente planta de producción opera a distintas temperaturas en cada una de las áreas y en cada uno de los equipos. Así pues se debe velar para conseguir alcanzar las temperaturas adecuadas en cada uno de los equipos, para ello se hace uso de diferentes aparatos, entre ellos se encuentran los intercambiadores de calor. Estos pueden dividirse en una gran sub conjunto con diferentes características.

Dependiendo de la función que desempeñe cada intercambiador de calor tendrá una morfología u otra, de este modo se engloban en este apartado los intercambiadores kettle reboiler, condensador o intercambiador estándar de carcasa y tubos.

Así pues, se muestra a continuación los cálculos efectuados para el diseño y dimensionamiento de este conjunto de equipos.

Para realizar los cálculos se ha hecho uso del programa ***Aspen Exchanger***, este permite el diseño de todo tipo de intercambiadores mediante la introducción de algunos parámetros clave, que son necesarios para el dimensionamiento del equipo.

Este conjunto de parámetros se detallan a continuación:

- Composición de los fluidos
- Caudal mísico de los fluidos
- Temperatura de entrada y salida de cada uno de los fluidos.
- Estado físico de los fluidos en la entrada y la salida (Fracción de vapor).
- Presión de los fluidos.
- Energía intercambiada.

Mediante la introducción de estos parámetros el presente programa puede realizar una estimación del tipo de intercambiador que se está tratando, es decir, si pertenece a un condensador, un intercambiador estándar sin cambio de fase o un evaporador tipo kettle reboiler. Mediante los parámetros introducidos el programa efectúa el cálculo del diseño. Pero, cabe destacar que no es necesario introducir todo el conjunto de datos, ya que cabe la posibilidad de dejar uno de ellos sin introducir de manera que el programa ejecuta una serie de operaciones para optimizar el parámetro resultante. De este modo el programa otorga una cierta libertad a la hora de introducir los parámetros.

El programa cuenta con una serie de herramientas que hacen posible la estimación del diseño mecánico, entre estas utilidades se encuentra la posibilidad de especificar el tipo de intercambiador, en el presente proyecto se han utilizado los siguientes tipos de intercambiadores:

- Intercambiador de carcasa y tubos: Empleado en los casos que es necesario un intercambio de calor sencillo y condensaciones.



-Kettle-Reboiler: Indicado en procesos donde la mezcla experimenta un cambio de líquido a gas y el fluido calefactor de vapor saturado a líquido, o bien conservando este último el estado en el caso de tratarse de vapor sobrecalentado.

-Intercambiadores aéro-refrigerante: Utilizado en intercambios de calor entre el aire atmosférico y el fluido refrigerante. Donde el aire presenta la función de absorber parte del calor que porta el fluido refrigerante.

FLUIDOS DE SERVICIO EMPLEADOS

Seguidamente se enumeran los diferentes fluidos empleados para efectuar los intercambios de calor a lo largo de la planta:

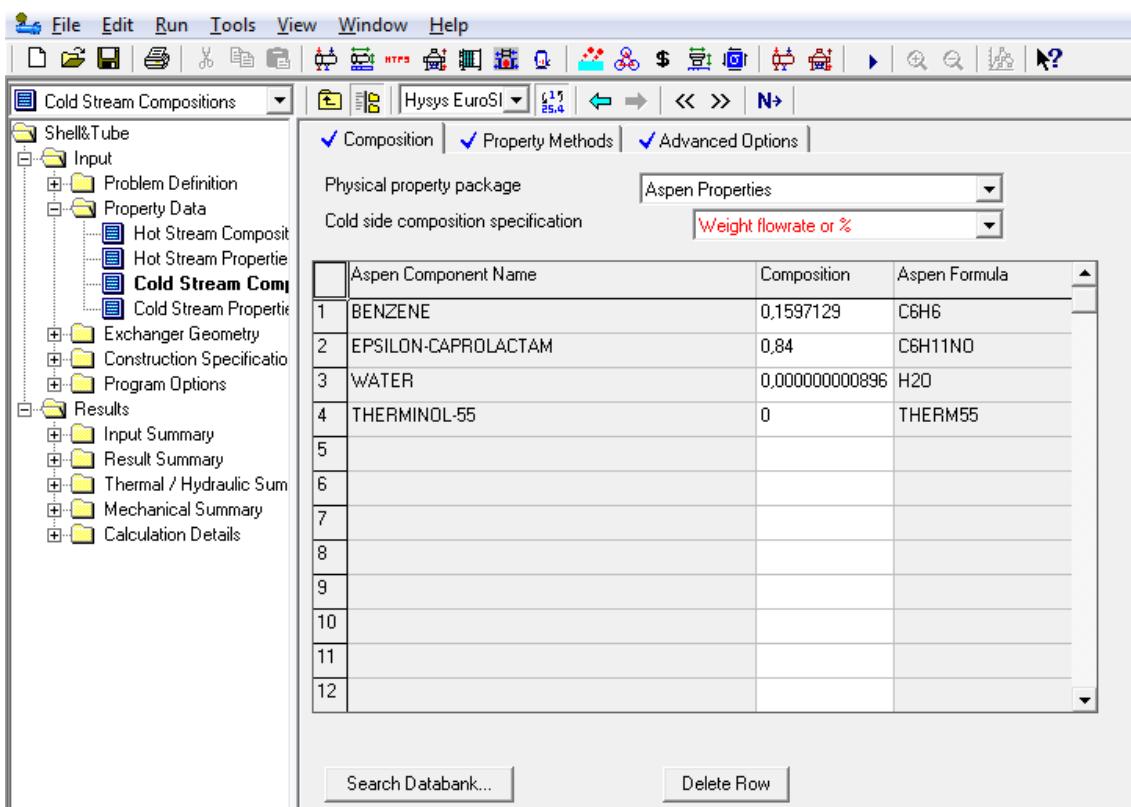
- Agua de torre: El agua de refrigeración de torre, proviene de la torre de refrigeración tal y como indica su nombre, este tipo de agua es enfriada mediante el intercambio de calor con el aire atmosférico, permitiendo de este modo un salto térmico de 15°C desde 45°C hasta 30°C.
- Agua de chiller: Este tipo de refrigerante proviene de los equipos de frío chiller, los cuales a diferencia de la torre de refrigeración permiten trabajar por debajo de la temperatura ambiente. De esta manera se consigue en estos equipos un salto térmico de 15°C, que va desde los 30°C hasta los 15°C.
- Vapor de turbina: Este tipo de vapor se consigue mediante la absorción del calor generado en las reacciones químicas. El calor desprendido es absorbido por el agua que se encuentra sobresaturada en estado líquido a elevadas temperaturas y presiones. Una vez captado el suficiente calor el fluido cambia de estado líquido a estado vapor saturado, este vapor a altas presiones se hace pasar por una turbina donde se da una considerable caída de presión que hace girar la turbina, el giro de esta produce electricidad. Cabe destacar que en la planta de producción de caprolactama no se encuentra ninguna turbina de vapor.
- Vapor de caldera: Este tipo de fluido calefactor se encuentra a una temperatura de 160°C y 6,2 bares de presión. No experimenta ningún salto térmico, únicamente cede el calor latente al pasar de vapor a líquido.
- Caldera de Therminol-55: Este fluido experimenta un salto térmico de 10°C desde los 300°C hasta los 290°C. La razón por la que se emplea este fluido reside en su alta resistencia al cambio de fase, de modo que es capaz de intercambiar calor en estado líquido a altas temperaturas, por lo que no es necesario aumentar la presión para asegurar el estado líquido y es factible operar a presión ambiental.



Diseño de los intercambiadores mediante Aspen Exchanger

Para llevar a cabo el diseño de los intercambiadores mediante este software, es necesario seguir los pasos que se detallan a continuación, primeramente es necesario introducir las fracciones másicas, molares o caudales de uno de los componentes de la mezcla. Los datos pertenecientes al fluido caliente se introducen en un apartado diferente al del fluido frío.

Tabla 11.7.1 composición de los corrientes



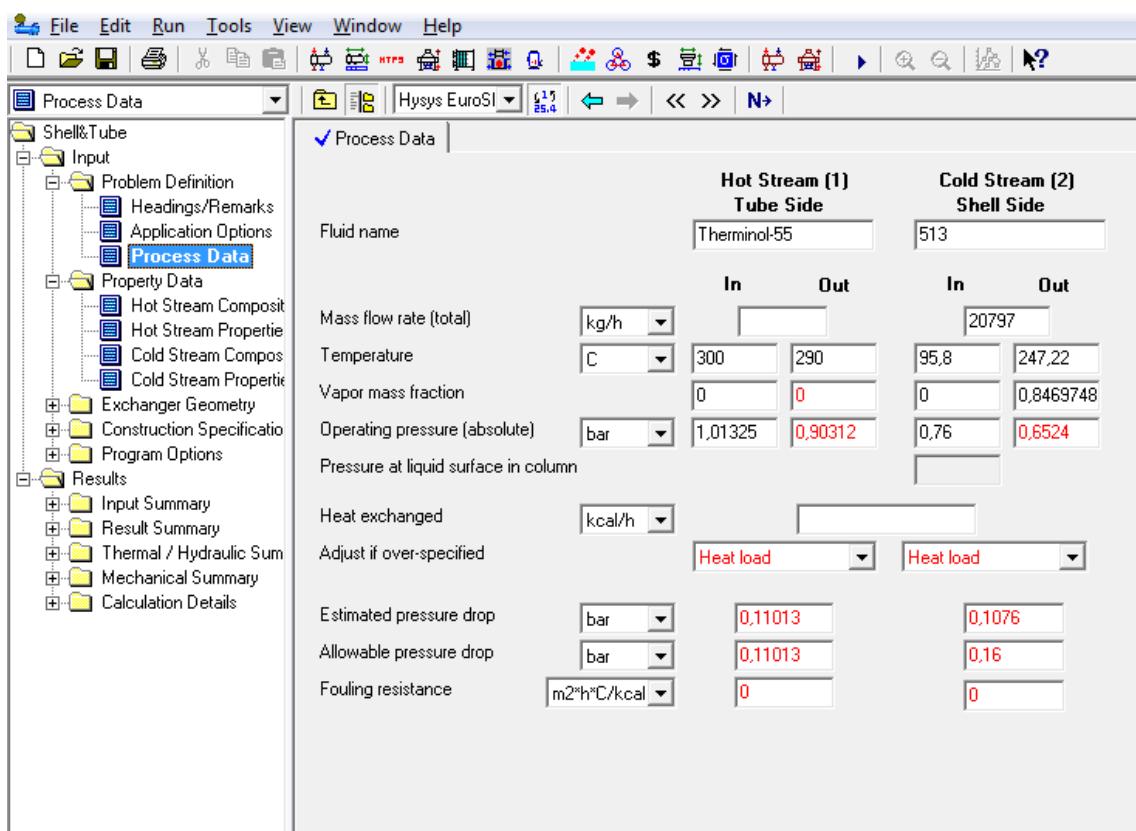
En la figura anterior se muestra la interfaz de trabajo que presenta el programa Aspen Exchanger, así como la manera en la que se han de colocar los diferentes compuestos de la corriente fría. Tal y como se observa la introducción de los datos puede ser en forma de porcentaje, de fracción o de caudal másico.



Una vez introducidos los datos de la corriente fría y caliente el proceso de simulación sigue en la carpeta *process data*, donde se deben especificar las temperaturas de entrada y salida de cada uno de los corrientes, los caudales máscicos y las presiones, entre otras opciones.

Este conjunto de valores se muestran en la siguiente figura, donde se observa como el software ofrece de forma automática una caída de presión estándar.

Tabla 11.7.2 composición de los corrientes



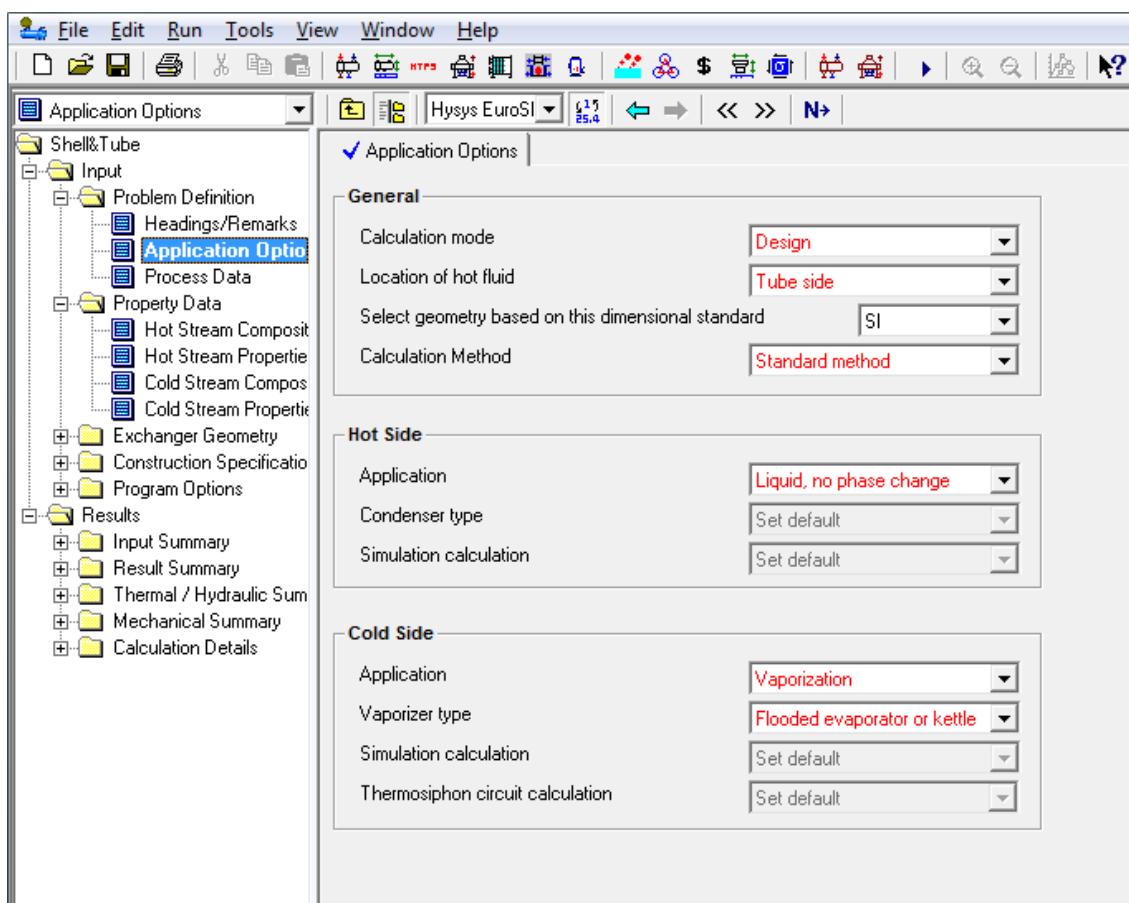
Como anteriormente ya se ha mencionado, no es necesario introducir todos los datos que se muestran en las celdas, ya que algunos los estima de forma automática y otros los puede calcular mediante las relaciones existentes entre los otros valores ya introducidos.



En el caso que se muestra en la figura se observa como el calor intercambiado y el caudal mísico del fluido calefactor no han sido introducidos, ya que el programa los calculará de forma automática gracias a las relaciones y propiedades físicas que presentan los demás componentes del sistema.

Una vez introducidos los datos de los diferentes componentes que circulan a través de los intercambiadores, se especifican las características que deben presentar los equipos, tales como la zona por donde deben circular los fluidos, si por tubos o carcasa, las especificaciones referentes a los cambios de estado de las diferentes corrientes y el modo de cálculo a seguir.

Tabla 11.7.3 composición de los corrientes



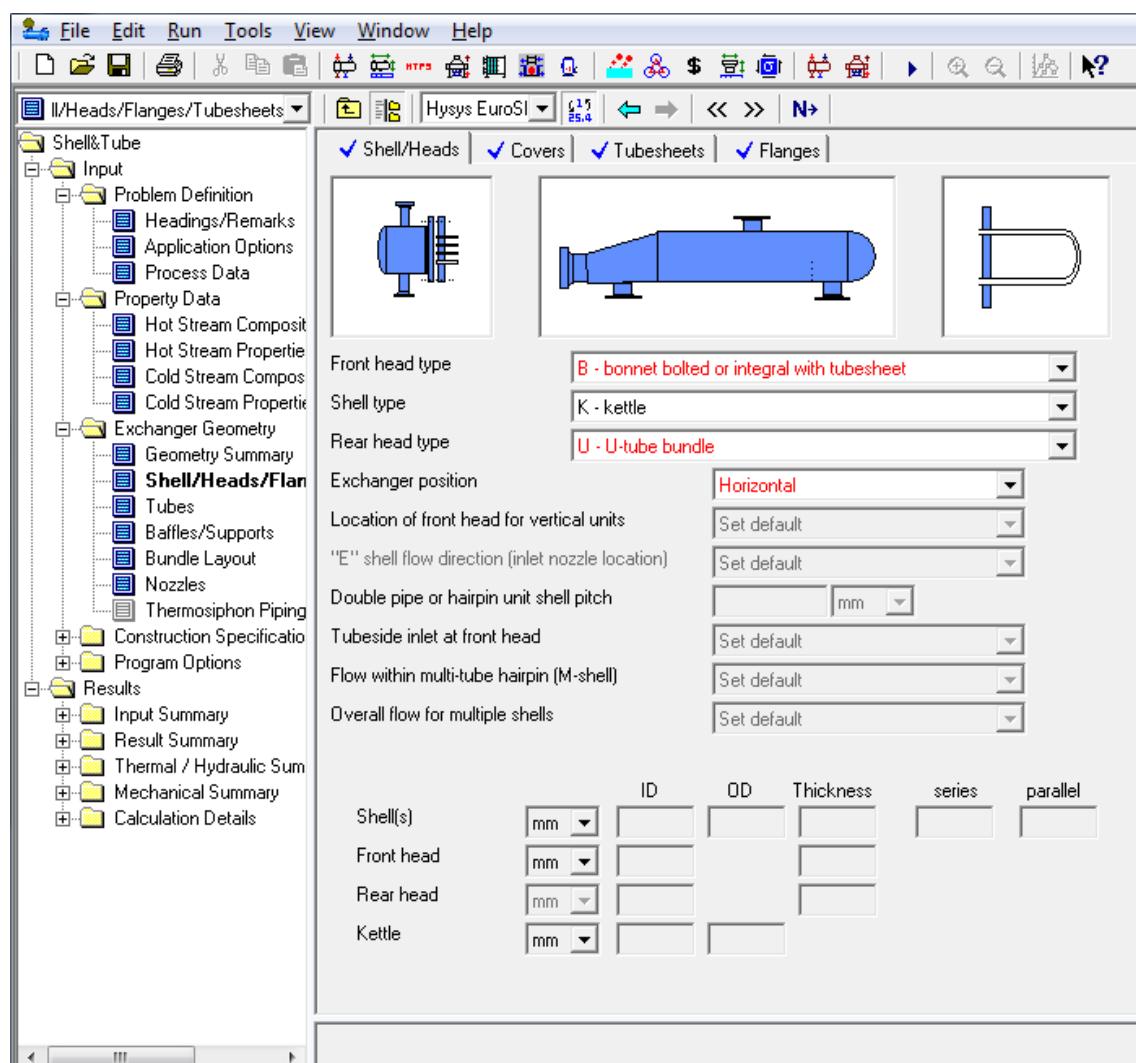


El siguiente paso consiste en determinar el tipo de geometría que debe presentar el intercambiador y el tipo de cabezales que conlleva.

En este caso se puede observar que se trata de un intercambiador tipo kettle reboiler con, en posición horizontal. Los grosos y de más características están marcadas por defecto del programa, aunque existe la posibilidad de modificarlas en el caso de que sea necesario.

En la siguiente figura se muestra la interfaz que exhibe el software para realizar este fin.

Tabla 11.7.4 composición de los corrientes





Por último pero no menos importante se deben detallar los materiales de construcción empleados en el diseño del intercambiador. El programa incorpora por defecto una serie de materiales extraídos de la base de datos ASME.

De modo que en función de las necesidades, ya sea por corrosión, peso, resistencia o únicamente por aspectos económicos se escoge un tipo de material u otro de entre los que ofrece el programa.

A continuación se expone una figura ilustrativa del programa.

Tabla 11.7.5 composición de los corrientes

Component	Material	Designator
Cylinder - hot side	Carbon Steel	1
Cylinder - cold side	SS 304L	7
Tubesheet	Carbon Steel	1
Double tubesheet (inner)		0
Baffles	SS 304L	7
Tubes	Carbon Steel	1



Una vez introducidos todos los datos y parámetros necesarios, se procede a la simulación del diseño, para ello se puede pulsar la tecla F5 o desplazarse hasta el símbolo *run* que se muestra en la barra de herramientas en la parte superior de la pantalla. De este modo si todos los parámetros han sido introducidos de forma correcta y siguiendo las leyes físicas el programa convergirá otorgando una solución.

El programa tiene en cuenta dos parámetros fundamentales en el proceso de optimización, estos son el área y el coste, de este modo, dándole prioridad al coste se han simulado las diferentes posibilidades que ofrece el programa.

De manera que siguiendo este método operacional se consiguen una serie de datos que son de gran interés para determinar la fiabilidad del resultado obtenido, así como los suficientes datos como para empezar el diseño físico del reactor en caso de que sea de interés.

Este conjunto de datos se muestran en las dos figuras siguientes.

Tabla 11.7.6 composición de los corrientes.

Overall Summary

1	Size	702	x	1350	mm	Type	BKU	Hor	Connected in Shells/unit	2 parallel	1 series
2	Surf/Unit (gross/eff./finned)	125,1	/	120,3	/					2	
3	Surf/Shell (gross/eff./finned)	62,5	/	60,1	/						
4											
5	Design PERFORMANCE OF ONE UNIT										
6											
7	Process Data					Shell Side	Tube Side		Heat Transfer Parameters		
8						In	Out		Total heat load	kcal/h	4080936
9	Total flow					20797		593856	Eff. MTD / 1 pass MTD	°C	61,51 / 62,49
10	Vapor	kg/h	0	20797		0	0		Actual/Reqd area ratio - fouled/clean		1,72 / 1,72
11	Liquid	kg/h	20797	0		593856	593856				
12	Noncondensable	kg/h	0			0					
13	Cond./Evap.					20797		0			
14	Temperature	°C	95,8	247,21		300	290				
15	Dew / Bubble point	°C	0	1		0	0				
16	Quality		0								
17	Pressure (abs)	bar	0,76	0,67705		1,01325	0,91316				
18	Delta P allow/calc	bar	0,16	0,08295		0,11013	0,10009				
19	Velocity	m/s	2,53	8,14		2,16	2,14				
20	Liquid Properties										
21	Density	kg/m³	933,36			670,25	678,77		Shell Side Pressure Drop	bar	%
22	Viscosity	cp	2,849			0,4262	0,4349		Inlet nozzle	0,00328	5,84
23	Specific heat	kJ/(kg K)	2,006			2,895	2,86		Inlet space Xflow	0	0
24	Therm. cond.	W/(m K)	0,1422			0,0956	0,0968		Baffle Xflow	0,03401	60,6
25	Surface tension	dynes/cm	31,6						Baffle window	0	0
26	Molecular weight		105,59			320	320		Outlet space Xflow	0	0
27	Vapor Properties										
28	Density	kg/m³	1,65						Outlet nozzle	0,01884	33,57
29	Viscosity	cp	0,0105						Intermediate nozzle		
30	Specific heat	kJ/(kg K)	1,974						Tube Side Pressure Drop	bar	%
31	Therm. cond.	W/(m K)	0,0258						Inlet nozzle	0,00861	8,6
32	Molar mass	kg/mol	100,00						Entering tubes	0,01091	10,9



Tabla 11.7.7 composición de los corrientes

Overall Summary

31	Therm. cond.	W/(m K)	0,0258	Inside tubes	0,07108	71,02		
32	Molecular weight		108,06	Exiting tubes	0,00404	4,03		
33	Two-Phase Properties			Outlet nozzle	0,00545	5,45		
34	Latent heat	kcal/kg	119,51	Intermediate nozzle				
35								
36	Heat Transfer Parameters			Velocity / Rho*V2				
37	Reynolds No. vapor		215949,9	Shell nozzle inlet	0,65	393		
38	Reynolds No. liquid	792,83	50491,8	Shell bundle Xflow	2,53	8,14		
39	Prandtl No. vapor		0,8	Shell baffle window				
40	Prandtl No. liquid	40,18	12,9	Shell nozzle outlet	56,2	5030		
41	Heat Load	kcal/h		Shell nozzle interm				
42	Vapor only	34969	0					
43	2-Phase vapor	209659	0	Tube nozzle inlet	1,69	1906		
44	Latent heat	2383795	0	Tubes	2,16	2,14		
45	2-Phase liquid	1136942	0	Tube nozzle outlet	1,67	1883		
46	Liquid only	315573	4080936	Tube nozzle interm				
47								
48	Tubes		Baffles	Nozzles: (No./OD)				
49	Type	Plain	Type	Unbaffled	Shell Side	Tube Side		
50	ID/OD	mm	14,83 / 19,05	0	Inlet	1 / 88,9	1 / 323,85	
51	Length act/eff	m	1,35 / 1,2885	Number	Outlet	1 / 21,34	1 / 323,85	
52	Tube passes		2	Cut orientation	Other	1 / 219,08	/	
53	Tube No.		658	Spacing: c/c	mm		Impingement protection	None
54	Tube pattern		30	Spacing at inlet	mm			
55	Tube pitch	mm	23,81	Spacing at outlet	mm			
56	Insert		None					
57	Vibration problem		Possible / Yes		RhoV2 violation			No

Todo el conjunto de intercambiadores que se encuentran en la planta han sido diseñados mediante este método operacional. Presentando sus características en cada una de sus respectivas hojas de especificaciones.



11.8. TUBERÍAS

En este proyecto, los cálculos en lo que se refiere a tuberías se limitan a la determinación del diámetro de estas. A continuación se explica el procedimiento de cálculo seguido.

11.8.1. Cálculo del diámetro interno de la tubería

El diámetro interno de una tubería se puede determinar según la ecuación siguiente, ya que la sección de esta es circular.

$$D_{int} = \sqrt{\frac{Q \cdot 4}{\pi \cdot v}} \quad (ec \ 11.8.1.1.)$$

Todos los parámetros de los que depende el diámetro están fijados excepto la velocidad de circulación del fluido. Esta velocidad se ha determinado utilizando los datos bibliográficos de velocidades típicas que se observan en las tablas 11.8.1-3 [Rules of thumb].

Tabla 11.8.1.1. Velocidades típicas de circulación de fluidos (I).

Service	Velocity, ft./sec.
Average liquid process	4-6.5
Pump suction (except boiling)	1-5
Pump suction (boiling)	0.5-3
Boiler feed water (disch., pressure)	4-8
Drain lines	1.5-4
Liquid to reboiler (no pump)	2-7
Vapor-liquid mixture out reboiler	15-30
Vapor to condenser	15-80
Gravity separator flows	0.5-1.5

**Tabla 11.8.1.2. Velocidades típicas de circulación de circulación de fluidos (II)****Typical Design Vapor Velocities* (ft./sec.)**

Fluid	Line Sizes		
	≤6"	8"-12"	≥14"
Saturated Vapor			
0 to 50 psig	30-115	50-125	60-145
Gas or Superheated Vapor			
0 to 10 psig	50-140	90-190	110-250
11 to 100 psig	40-115	75-165	95-225
101 to 900 psig	30-85	60-150	85-165

Tabla 11.8.1.3 Velocidades típicas de circulación de circulación de fluidos (III).

Service/Application	Velocity, ft./min.
Forced draft ducts	2,500-3,500
Induced-draft flues and breeching	2,000-3,000
Chimneys and stacks	2,000
Water lines (max.)	600
High pressure steam lines	10,000
Low pressure steam lines	12,000-15,000
Vacuum steam lines	25,000
Compressed air lines	2,000
Refrigerant vapor lines	
High pressure	1,000-3,000
Low pressure	2,000-5,000
Refrigerant liquid	200
Brine lines	400
Ventilating ducts	1,200-3,000
Register grilles	500

Una vez determinado el diámetro de la cañería se ha estandarizado según los valores de los diámetros comerciales. En la tabla 11.8.1.4. se incluyen los diámetros comerciales en pulgadas y su equivalencia al sistema métrico (mm).

**Tabla 11.8.1.4. Diámetros comerciales de tuberías en pulgadas y mm.**

Tamaño estándar tradicional (pulg)	Tamaño métrico DN (mm)	Tamaño estándar tradicional (pulg)	Tamaño métrico DN (mm)	Tamaño estándar tradicional (pulg)	Tamaño métrico DN (mm)
1/8	6	6	150	30	750
1/4	8	8	200	32	800
3/8	10	10	250	36	900
1/2	15	12	300	40	1000
3/4	20	14	350	42	1100
1	25	16	400	48	1200
1 1/4	32	18	450	54	1400
1 1/2	40	20	500	60	1500
2	50	22	550	64	1600
2 1/2	65	24	600	72	1800
3	80	26	650	80	2000
4	100	28	700	88	2200

Cabe que comentar que se ha tenido en cuenta también el efecto de esta estandarización en la velocidad de circulación del fluido. Por ello, se ha recalculado la nueva velocidad de circulación y se ha comprobado que esta se encuentra dentro de los valores bibliográficos.

11.8.2 Aislamiento térmico

En lo referente al aislamiento de tuberías, se ha decidido trabajar con lana de roca para conducciones que transporten fluidos calientes y Armaflex para los fríos.

La determinación del espesor del aislamiento en el caso de la lana de roca se ha realizado con el programa Insulan de la empresa Calorcol S.A., al igual que en el caso de aislamiento de equipos.

Por otro lado, cuando se tren el caso de trabajar con fluidos a baja temperatura, el espesor de Armaflex se ha determinado a través del software ArmWin SA proporcionado por la empresa Armacell. La figura 11.8.2.1. muestra una captura de este programa.

11. MANUAL DE CÁLCULO

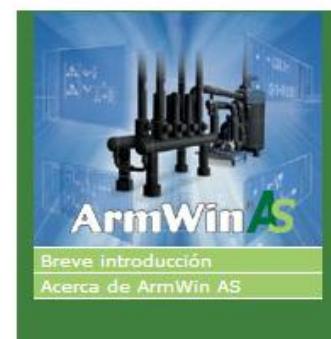
CaprolacTeam, Caprolactam Industries



Seleccione las opciones en las cuales deben basarse sus cálculos

...

Área de Aplicación	Refrigeración y Climatización
Producto	AF/Armaflex
Opción	Es necesario calcular el espesor del aislamiento
Objeto	Tubería
Fluido	Líquido
Calcular...	Temperatura de superficie exterior
Tipo de tubería	Tubos de acero



Introduzca los valores en los cuales deben basarse sus cálculos ...

» Utilice , (coma) como separador de decimales
» NO utilice separador de miles

Temperatura superficial	<input type="text"/> °C	
Temperatura ambiente	<input type="text"/> °C	<input type="text"/> Introduzca el valor manualmente o selecciónelo en la lista
Temperatura interior	<input type="text"/> °C	
Diámetro exterior	<input type="text"/> mm	<input type="text"/> Introduzca el valor manualmente o selecciónelo en la lista
Coeficiente superficial de transmisión de calor, Coeficiente superficial de transmisión de calor interior	<input type="text"/> W/(m ² · K)	<input type="text"/> Introduzca el valor manualmente o selecciónelo en la lista
		<input type="text"/> Medio líquido [1000]

Calcular



Figura 11.8.2.1. ArmWin AS. Cálculo del espesor de Armaflex.



11.9. EQUIPOS DE IMPULSIÓN DE FLUIDOS

11.9.1. Bombas

11.9.1.1. Determinación de la potencia

La potencia requerida de una bomba se determina mediante el balance de energía o ecuación de Bernoulli, por el cual:

$$E_{Presión} + E_{Potencial} + E_{cinética} - P_{bomba} + Fricción = 0 \text{ (ec. 11.9.1.1.)}$$

$$\frac{m}{\rho} \cdot (P_2 - P_1) + m \cdot g \cdot (z_2 - z_1) + m \cdot \frac{(v_2^2 - v_1^2)}{2 \cdot \alpha} - m \cdot \hat{w} + \sum F = 0 \text{ (ec. 11.9.1.2.)}$$

Trabajando en unidades de masa (J/kg, o lo que es lo mismo m^2/s^2) y aislando el parámetro correspondiente al trabajo de la bomba (\hat{w}), se obtiene la expresión siguiente:

$$\hat{w} = \left(\frac{P_2 - P_1}{\rho} \right) + g \cdot \Delta z + \frac{1}{2 \cdot \alpha} (v_2^2 - v_1^2) + \sum F \text{ (ec. 11.9.1.2.)}$$

Donde los subíndices 1 y 2 corresponden al inicio y fin del tramo estudiado. Los demás parámetros hacen referencia a:

v_1 y v_2 son las velocidades del fluido en los puntos 1 y 2 respectivamente. La velocidad de circulación por tubería se considera constante e igual a 1,5 m/s, por lo que este parámetro no tendría efecto en el cálculo de la potencia.

g es la fuerza de la gravedad ($9,81 \text{ m/s}^2$).

ρ es la densidad del fluido en circulación (kg/m^3).

α es una constante que depende del tipo de flujo. Esta constante toma el valor de 1 en régimen turbulento y 0,5 en régimen laminar. Así pues, dado que todas las tuberías operan en régimen turbulento, esta constante tendrá siempre un valor de 1 en los cálculos realizados.



P_1 o P_2 son las presiones del fluido de en los puntos 1 y 2 (Pa).

$\Delta z = z_2 - z_1$, es la diferencia de alturas entre el punto 1 y el punto 2 de tuberías, que a su vez es también la altura a la que debe impulsar la bomba el fluido (m).

$\sum F$ corresponde a las pérdidas de carga por fricción totales (J/kg) entre los puntos 1 y 2 de la cañería. Estas pérdidas se determinan como:

$$\sum F = \sum F_{tramo\ recto} + \sum F_{accidentes} \quad (ec. 11.9.1.3.)$$

Para tramos rectos, las pérdidas calculan según la ecuación:

$$\sum F_{tramo\ recto} = 2 \cdot f \cdot \frac{L}{D} \cdot v^2 \quad (ec. 11.9.1.4.)$$

Donde:

L es la longitud de tubería del tramo recto (m).

D es el diámetro interno de tubería (m).

v es la velocidad a la que circula el fluido por el interior de tubería (m/s).

f es el factor de fricción de Fanning (adimensional).

El factor de fricción de Fanning se ha determinado gracias al diagrama de Moody (figura 11.9.1.1.).

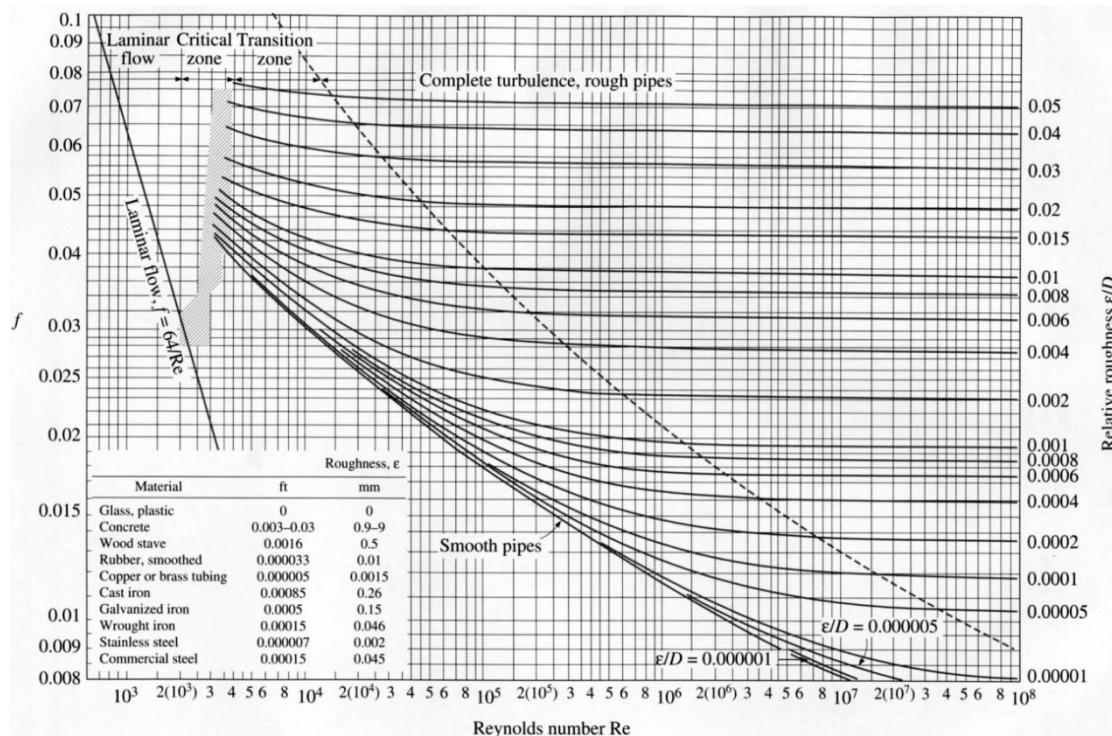


Figura 11.9.1.1 Diagrama de Moody.

Es importante comentar que el parámetro f de esta gráfica no se corresponde con el factor de fanning sino con el factor Darcy, que está relacionado con el anterior como:

$$f_{\text{fanning}} = \frac{f_{\text{Darcy}}}{4} \quad (\text{ec. 11.9.1.5.})$$

Así pues, de acuerdo con el diagrama, el factor de fricción depende del Reynolds (Re) y la rugosidad relativa (ε/D), que corresponde a la rugosidad del material entre diámetro de la tubería. Este diagrama representa la evolución del factor de fricción de Darcy. Estos dos factores de fricción están relacionados de la siguiente manera:

También cabe comentar que la ecuación mediante la cual se determina el Reynolds es:

$$Re = \frac{\rho \cdot v \cdot D}{\mu} \quad (\text{ec. 11.9.1.6.})$$



Por otro lado, salvo casos excepcionales, las pérdidas de carga por accidentes sólo se pueden determinar de forma experimental, y puesto que son debidas a una disipación de energía motivada por las turbulencias, pueden expresarse en función de la altura cinética corregida mediante un coeficiente empírico K. De este modo, la ecuación correspondiente a las pérdidas por accidentes es la siguiente:

$$F_{accidente} = K \cdot \frac{v^2}{2} \quad (\text{ec. 11.9.1.7.})$$

El coeficiente K es adimensional y depende del tipo de singularidad y de la velocidad media en el interior de la tubería. En la práctica y para cálculos rápidos que no precisen de gran exactitud, se suelen adoptar los valores aproximados de K que se incluyen en la tabla 11.9.1.1.

Tabla 11.9.1.1. Valores aproximados de K.

ACCESORIO	K	ACCESORIO	K
Válvula de compuerta		Válvula de bola	
abierta	0,17	Abierta	0,04
3/4 abierta	0,9	cerrada 5º	0,05
1/2 abierta	4,5	cerrada 10º	0,29
Válvula de asiento		cerrada 20º	
abierta	9	Válvula de mariposa	
1/2 abierta	36	Abierta	0,15
1/4 abierta	112	cerrada 5º	0,24
Válvula de diafragma		cerrada 10º	
abierta	2,3	cerrada 20º	1,54
3/4 abierta	2,6	Válvula de retención	
1/4 abierta	21	De bola (abierta)	70
Entradas		T estándar	
Encañonadas	0,78	con bifurcación cerrada	0,4
redondeada	0,04	división de caudal	1
Salidas		Codo	
Encañonadas	1	90º standard	0,75
redondeada	1	45º standard	0,35



Una vez determinadas las pérdidas por fricción, se puede realizar el cálculo de la carga necesaria de la bomba (\hat{w}). De este modo, la potencia teórica en vatios (W) corresponde a:

$$P_{teórica} = \hat{w} \cdot m \text{ (ec. 11.9.1.8.)}$$

Donde m es el caudal másico de trabajo de la bomba (Kg/s).

No obstante, al tratarse de máquinas reales, las bombas no son capaces de transformar la totalidad de la energía que se les proporciona ya una parte de la energía se disipa en forma de calor, por fricción, etc. Así pues, se ha de aplicarse un factor de rendimiento para corregir estas pérdidas. El rendimiento (η) de este tipo de equipos acostumbra a ser del 70%, por lo que la potencia real de la bomba deberá ser:

$$P_{real} (W) = \frac{P_{teórica} (W)}{\eta} = \frac{P_{teórica} (W)}{0,70} \text{ (ec. 11.9.1.9.)}$$

11.9.1.2. Determinación del NPSH de la bomba

Por otro lado, también es importante calcular el NPSH de la bomba (Net Positive Suction Head o Altura Neta Positiva en Aspiración). Este parámetro es la diferencia, en cualquier punto de un circuito hidráulico, entre la presión en ese punto y la presión de vapor del líquido en ese punto.

Siempre se debe mantener el NPSH_{disponible} de la bomba por encima del NPSH_{requerido} (valor mínimo). Si la carga fuese menor que este, o lo que es lo mismo, menor que la presión de vapor de nuestro fluido, parte del líquido se evaporaría, dando lugar al fenómeno de la cavitación por el cual provoca ruido y daños en el equipo. El NPSH disponible se determina como:

$$NPSH_{disponible} = \frac{P_0 - P_v}{\rho \cdot g} + h_0 - h_f \text{ (ec. 11.9.1.10.)}$$



Donde:

P_0 es la presión que actúa sobre el líquido que se bombea (Pa).

P_v es la presión de vapor del fluido en circulación, es decir, la presión a la cual éste se halla en equilibrio con su vapor (Pa).

h_0 es el nivel de líquido por encima de la entrada de la bomba(m).

h_f es la pérdida de carga de un fluido por la tubería (m), y puede calcularse según la ecuación:

$$h_f = f_{Darcy} \cdot \frac{L}{D} \cdot \frac{v^2}{2 \cdot g} \quad (ec. 11.9.1.11.)$$

Este cálculo en algunos casos se ha realizado gracias a la herramienta SIHIdeltaP que ofrece la empresa SIHI en su página web. Este programa permite, de un modo sencillo, determinar el NPSH disponible así como la pérdida de carga que se experimenta. El procedimiento a seguir ha sido, en primer lugar, introducir las propiedades del fluido así como los accidentes y los diferentes parámetros de la tubería. En la figura 11.9.1.2. se observa una captura de esta herramienta:

11. MANUAL DE CÁLCULO

CaprolacTeam, Caprolactam Industries



SIHI *deltaP*

Ayuda Contacto ?

1. Selección del fluido 2. Cálculo de las pérdidas de carga 3. Modelo de circuito

Caudal: 0 m³/h

Datos del fluido: 0 °C, Densidad: 0 kg/m³, Viscosidad: 0 cP, Tensión de vapor: 0 kPa

TRAMO DE TUBERIA DE ASPIRACIÓN: Pérdida de carga total del tramo: 0 m, Diámetro nominal: 0 mm

TRAMO DE TUBERIA DE IMPULSION: Pérdida de carga total del tramo: 0 m, Diámetro nominal: 0 mm

Los números deben ser escritos con puntos (.), no con comas (,)

Arrastre un elemento aquí

Arrastre un elemento aquí

Figura 11.9.1.2. Captura SiHI *deltaP*.

Por último, también se requiere especificar la configuración del circuito y las presiones y alturas de aspiración e impulsión. Una vez introducidos todos los factores, el programa resuelve el sistema indicando el NPSH disponible y las pérdidas de carga del sistema.

1. Selección del fluido 2. Cálculo de las pérdidas de carga 3. Modelo de circuito

Los números deben ser escritos con puntos (.), no con comas (,)

Caudal: 0 m³/h

Pérdidas de carga en aspiración: 0 m

Pérdidas de carga en impulsión: 0 m

Presión de aspiración: 1013 mbar

Presión de impulsión: 1013 mbar

Altura geométrica en aspiración: 0 m

Altura geométrica en impulsión: 0 m

Elección de la configuración del circuito

Resultados: Altura total: 0 m, Pérdida de carga: 0 m, NPSH disponible: 10.1 m

Figura 11.9.1.3. Captura SiHI *deltaP*.



Por otro lado, el NPSH requerido es un parámetro de diseño de la bomba que depende de las características de ésta, por lo que es un dato que debe proporcionar el fabricante en sus curvas de operación. Como valores de referencia, normalmente el NPSH disponible debe estar 3 m por encima del requerido para bombas de menos de 100 m³/h y de 6 m para bombas de mayor capacidad [Coulson and Richardson, 2002]. Por ello, en la elección de las bombas de proceso, se han estudiado las curvas características del equipo o los datos de carga proporcionados por el fabricante, seleccionando siempre aquellas bombas con un NPSH de interés.

11.9.1.3. Bombas de vacío

En el caso de las bombas de vacío se requiere un cálculo especial para la determinación de la potencia. El primer parámetro a calcular es la capacidad de vacío (m³/h) que deberá tener la bomba. Este caudal se puede determinar mediante la siguiente ecuación:

$$Q = \frac{V_{sistema}}{t} \cdot \ln \frac{P_{atm}}{P_{vacío}} \quad (ec. 11.9.1.12.)$$

Donde:

T es el tiempo de vacío (min). Este parámetro puede ser de entre 3 y 10 minutos. En este caso, se ha decidido ser conservativo por lo que se ha tomado como 10 minutos, 0,17 horas.

P_{atm} y P_{vacío} son la presión atmosférica y la presión de vacío a la que se quiere llegar (Pa), respectivamente.

V_{sistema} es el volumen total del sistema (m³), que comprende todo los elementos en los que se quiere hacer el vacío. En este caso, el proceso productivo requiere condiciones de vacío en columnas, por lo que el volumen de vacío será el



volumen de la columna, el reboiler y el condensador, así como el condensador total, el tanque (en el que se rompe el posteriormente el vacío) y los conductos.

De este modo, se ha determinado el caudal de gas que deberá evacuar cada una de las bombas de vacío. Cabe comentar que conociendo este caudal también se ha realizado dimensionamiento de estas tuberías.

En cuanto a la potencia que deberá tener este tipo de maquinas, la fórmula utilizada ha sido la siguiente:

$$P_{is} = \frac{10^{-3}}{27} \cdot P_a \cdot \dot{S} \cdot \ln \frac{P_e}{P_a} \quad (\text{ec. 11.9.1.13.})$$

Donde:

P_{is} es la potencia de compresión isotérmica (kW).

P_a es la presión de atmósfera (mmHg (abs)).

P_e es la presión de vacío deseada (mmHg (abs)).

\dot{S} es la capacidad de succión (m^3/h).

$(10^{-3}/27)$ es una constante de conversión.

No obstante, la energía que debe proporcionarse a este tipo de equipos debe ser superior a la calculada ya que existen pérdidas por fricción que pueden representar un 50-60% del trabajo proporcionado. Bibliográficamente se ha obtenido que el valor óptimo del rendimiento isotérmico es de entre el 25 y el 0,4%. De este modo, se ha asumido un rendimiento del 30%.

$$P_{is} = \frac{P_{is}}{0,3} \quad (\text{ec. 11.9.1.14.})$$



11.10 ESCAMADORA ES-501

11.10.1. Introducción

Para concluir el proceso de purificación se utiliza una escamadora, cuyo objetivo consiste en obtener la caprolactama en forma de finas escamas sólidas, para poder ser almacenada en silos.

Para que este proceso sea posible, es necesario unir las dos corrientes de producto en una sola y enfriarlas deliberadamente, para que entren a una temperatura suficientemente pequeña para que sea posible el proceso de escamación mediante este equipo. En todo caso, hay que tener en cuenta y hay que controlar que la corriente del producto cumpla con la pureza mínima del 99.5% en masa de caprolactama.

11.10.2. Diseño general de la escamadora E-501

En la bibliografía no se ha encontrado un procedimiento experimental para su diseño detallado, por lo que se ha buscado una escamadora ya diseñada por alguna empresa. Concretamente, se ha consultado el catálogo (Ref. pag. web) y se ha escogido una escamadora de rodillo.

Durante el proceso en continuo, una fina capa de producto líquido se adhiere al exterior del cilindro en rotación que posee la escamadora. El producto se solidifica por contacto con la pared exterior del cilindro en rotación, donde circula agua de refrigeración procedente del área de servicios. Una vez se ha completado una vuelta del cilindro, el producto solidificado se retira por medio de una cuchilla rascadora, permitiendo un mejor manejo en el almacenaje del producto en forma de copos o escamas.

Para el diseño de la escamadora es necesario saber la capacidad máxima de líquido que se puede procesar para escoger un modelo. Pero en este caso no se encontró este parámetro y se buscaron velocidades típicas de giro de rodillo y un



espesor de capa de líquido. A partir de estos parámetros y las necesidades de refrigeración se ha escogido un modelo.

A continuación se presenta el diseño detallado de la escamadora en la siguiente tabla.

Tabla 11.10.1. Especificaciones de corrientes de la escamadora ES-501

Modelo	Drum flaker K-15/30
Longitud (m)	5
Altura (m)	2,5
Amplitud (m)	2,4
Tipo escamadora	Rodillo
Diámetro rodillo (m)	1,5
Longitud rodillo (m)	3
Velocidad giro (rpm)	20
Espesor capa (mm)	1
Qv (m³/h)	6,36
Necesidades refrigeracion (kW)	305
Caudal refrigeración (kg/h)	18730
Potencia motor (kW)	7,5
Peso vacío (kg/h)	8800
Peso en operación (kg/h)	9500