UAB Universitat Autònoma de Barcelona

Escola d'Enginyeria

FORMATECH
SOLUCIONS INDUSTRIALS

PLANTA DE PRODUCCIÓ DE FORMALDEHID

PROJECTE DE FI DE GRAU
Enginyeria Química
Juny 2026

Carles Cervantes Ricaldi
Mario Fernández Herrán
Adrian Leo Herrera
Eric Miras Brea
Leandro Rafaelich Piulats
Uc Riera Rojas

TUTOR
Josep Anton Torà

CC BY SA

UAB Universitat Autònoma de Barcelona

Escola d'Enginyeria

FORMATECH
SOLUCIONS INDUSTRIALS

PLANTA DE PRODUCCIÓ DE FORMALDEHID

PROJECTE DE FI DE GRAU
Enginyeria Química

Juny 2026

CAPÍTOL 11: MANUAL DE CÀLCULS

Taula de continguts

11.1. Disseny reactors Multitubulars Formox..... 14

11.1.1. Descripció procés.....14

11.1.2. Reaccions i termodinàmica 14

11.1.3. Catalitzador Fe-Mo.....15

11.1.3.1. Composició i propietats 15

11.1.3.2. Mecanisme Mars-vam Krevelen.....15

11.1.3.3. Desactivació 16

11.1.4. Bases del disseny i dades d'alimentació 16

11.1.4.1. Verificació del LIE (Límit Inferior d'explosivitat) 17

11.1.4.2. Condicions d'operació 17

11.1.4.3. Justificació temperatura de disseny 18

11.1.4.4. Justificació 2 reactors en paral·lel..... 18

11.1.5. Cinètica de reacció – Model LH (Deshmukh) 18

11.1.5.1. Tipus de model cinètic 18

11.1.5.2. Expressions cinètiques 18

11.1.5.3. Cobertures superficials (Langmuir).....19

11.1.5.4. Dependència d'Arrhenius.....19

11.1.5.5. Taula de paràmetres.....20

11.1.6. Balanços de matèria en un PBR 1D 20

11.1.6.1. Model PBR 1D 20

11.1.6.2. Variable independent: massa de catalitzador W.....20

11.1.6.3. Equació diferencial general 21

11.1.6.4. Equacions per component 21

11.1.6.5. Conversió i selectivitat 21

11.1.7. Balanç d'energia 22

11.1.7.1. Plantejament 22

11.1.7.2. Terme de generació de calor 22

11.1.7.3. Terme extracció de calor.....22

11.1.7.4. Capacitat calorífica mescla 22
11.1.7.5. Resultats del balanç 23
11.1.8. Balanç d'energia Therminol 66 23
11.1.8.1. Equació diferencial 23
11.1.8.2. Propietats del Therminol 66 23
11.1.8.3 Càlcul del ΔTc i calor evacuat 24
11.1.9. Caiguda de pressió al llit (Ergun) 24
11.1.9.1. Equació d'Ergun 24
11.1.9.2. Conversió a la variable W 24
11.1.9.3. Càlcul a l'entrada del reactor 25
11.1.9.4. Resultats integrats (MATLAB) 26
11.1.10. Geometria dels tubs i del feix 26
11.1.10.1. Selecció dels tubs 26
11.1.10.2 Disposició dels tubs 26
11.1.10.3. Àrea de pas del gas 27
11.1.10.4. Volum del llit i massa de catalitzador 27
11.1.10.5. Àrea específica de transferència de calor 27
11.1.10.6. Velocitat del gas 27
11.1.11. Dimensionament del diàmetre de la carcassa 27
11.1.11.1. Mètode de Coulson & Richardson 27
11.1.11.2. Càlcul del diàmetre del feix 28
11.1.11.3. Holgura i diàmetre de la carcassa 28
11.1.11.4. Verificació geomètrica 28
11.1.11.5. Dimensions finals i proporcions 28
11.1.12. Capçals i tubesheets 29
11.1.12.1. Capçals el·lipsoidals 2:1 29
11.1.12.2. Tubesheets 29
11.1.13. Selecció de materials 30
11.1.13.1. Criteris 30
11.1.14. Gruix de paret – ASME VIII Div.1 31

11.1.14.1. Marc normatiu 31
11.1.14.2. Paràmetres de càlcul 31
11.1.14.3. Càlcul 32
11.1.14.4. Gruix mínim constructiu 32
11.1.14.5. Càlcul capçals el·lipsoidals 32
11.1.14.6. Gruix dels tubs 32
11.1.15. Pesos del reactor 32
11.1.15.1 Metodologia 32
11.1.15.2. Carcassa cilíndrica 33
11.1.15.3. Dos capçals el·lipsoidals 33
11.1.15.4. Feix tubular 33
11.1.15.5. Tubesheets 33
11.1.15.6. Catalitzador 33
11.1.15.7. Therminol retingut a la carcassa 34
11.1.15.8. Pes total en operació 34
11.1.16. Volum del reactor 34
11.1.16.1. Volum del cilindre 34
11.1.16.2. Volum dels capçals el·lipsoidals 2:1 35
11.1.16.3. Volum interior 35
11.1.17. Coeficient global de transferència de calor U 35
11.1.17.1. Definició i circuit de resistències 35
11.1.17.2. Coeficient h_o (costat carcassa — Therminol) 36
11.1.17.3. Coeficient h_i (gas en llit empaquetat) 36
11.1.17.4. Resistència de la paret 36
11.1.17.5. U global calculat 36
11.1.18. Rendiment i corrents del procés 37
11.1.18.1. Indicadors de rendiment 37
11.1.18.2. Corrents per reactor 37
11.1.18.3. Corrents totals 38
11.1.19. Perfils axials 39

11.1.19.1. Perfil de cabals molars 39
11.1.19. 2 Perfil de temperatura 41
11.1.19. 3. Perfil de conversió i selectivitat axial 42
11.1.19.4 Perfil de pressió axial 44
11.1.20. Codi de MATLAB 45

11.2 Disseny Intercanviadors de calor 57
11.2.1. Objectiu i abast 57
11.2.2. Base de disseny 57
11.2.2.1 Dades de procés realment disponibles 57
11.2.2.2. Propietats de la mescla obtingudes a ASPEN HYSYS 58
11.2.3. Hipòtesis de càlcul 59
11.2.3.1. Hipòtesis necessàries per completar el predimensionament 59
11.2.4. Desenvolupament seqüencial del mètode de Kern 60
11.2.4.1. Balanç tèrmic 60
11.2.4.2. Càlcul de la DTML 60
11.2.4.3. Correcció de la DTML 60
11.2.4.4. Selecció inicial de l'àrea i de la geometria dels tubs 61
11.2.4.5. Diàmetre del feix, diàmetre de carcassa i relació L/Ds 61
11.2.4.6. Selecció del nombre de passos per tubs a partir de la velocitat 62
11.2.4.7. Deflectors i àrea de pas a carcassa 62
11.2.4.8. Coeficient individual costat tubs 62
11.2.4.9. Coeficient individual costat carcassa 63
11.2.4.10. Coeficient global real 63
11.2.4.11. Pèrdues de càrrega 63
11.2.5. Resum de les iteracions i decisió final 64
11.2.5.1. Iteracions rellevants del disseny 64

11.3. Disseny evaporadors 64
11.3.1. Objectiu i abast 64
11.3.2. Dades de partida i propietats adoptades 65

11.3.3. Hipòtesis de disseny 66
11.3.4. Desenvolupament del càlcul 66
11.3.4.1. Balanç Tèrmic 66
11.3.4.2. Càlcul DTML 68
11.3.4.3. Correcció de la DTML 68
11.3.4.4. Selecció de l'intercanviador 68
11.3.4.5. Correcció U amb l'àrea real 70
11.3.4.6. Coeficients individuals 71
11.3.4.7. Coeficient global real 73
11.3.4.8, Pèrdues de càrrega 74
11.3.5. Comprovacions específiques de kettle reboiler 74

11.4. Disseny condensadors 75
11.4.1. Objectiu i criteri general de disseny 75
11.4.2. Dades de partida 76
11.4.2.1. Dades de procés 76
11.4.2.2. Composició màssica del corrent de procés 76
11.4.2.3. Dades del refrigerant 77
11.4.3. Propietats i hipòtesis adoptades 77
11.4.3.1. Propietats del procés 77
11.4.3.2. Hipòtesis principals 77
11.4.4. Desenvolupament del càlcul segons la seqüència de Kern 78
11.4.4.1. Balanç tèrmic 78
11.4.4.2. Assignació de fluids 79
11.4.4.3. Temperatura de condensació 79
11.4.4.4. Cabal d'aigua de refrigeració 79
11.4.4.5. Càlcul de la DTML 80
11.4.4.6. Estimació inicial del coeficient global i àrea requerida 80
11.4.4.7. Selecció preliminar dels tubs 80
11.4.4.8. Nombre de tubs i àrea instal·lada 81
11.4.4.9. Diàmetre de carcassa i relació L/D 81

11.4.4.10. Selecció de passos per tubs i velocitat de l'aigua 82
11.4.4.11. Deflectors de carcassa 82
11.4.4.12. Coeficient global requerit amb l'àrea instal·lada 83
11.4.4.13. Coeficient de pel·lícula del costat tubs 83
11.4.4.14. Factors d'embrutiment i coeficient brut 84
11.4.4.15. Pèrdues de càrrega 84
11.4.5. Justificació tècnica 85
11.4.6. Taula final de dades adoptades 85

11.5. Càlcul requeriments aerorefrigerador 86
11.5.1. Objectiu de l'equip dins del procés 86
11.5.2. Base de disseny i dades de partida 86
11.5.3. Hipòtesis adoptades 87
11.5.4. Metodologia general de selecció 87
11.5.5. Balanç tèrmic del circuit 87
11.5.5.1. Calor total cedit pel Therminol 66 88
11.5.5.2. Calor total absorbit pel Therminol 66 88
11.5.5.3. Calor net a retirar 88
11.5.6. Cabal total que passa pel refrigerador 88
11.5.7. Càlcul del salt tèrmic del refrigerador 89
11.5.8. Temperatures d'entrada i sortida 89
11.5.9. Condicionant hidràulic: cabal volumètric 90
11.5.10. Estimació de diàmetres principals 90
11.5.11. Modularització de l'equip 91
11.5.12. Selecció de l'equip 91
11.5.13. Dimensions i pes preliminars 92

11.6. Càlcul requeriments caldera 93
11.6.1. Objectiu del manual 93
11.6.2. Funció de l'equip dins del procés 93
11.6.3. Dades de partida 93

11.6.4. Comprovació del fluid Therminol 66 94
11.6.5. Metodologia de selecció pas a pas 94
11.6.6. Càlcul de la càrrega tèrmica 95
11.6.6.1. Conversió del cabal màssic 95
11.6.6.2. Increment de temperatura 95
11.6.6.3. Calor específic equivalent 95
11.6.6.4. Comprovació amb entalpia tabulada 96
11.6.7. Conversió del cabal i cabal volumètric 96
11.6.8. Selecció del model comercial 97
11.6.8.1. Factor de càrrega del model escollit 97
11.6.9. Consum de combustible i potència de combustió 97
11.6.9.1. Estimació pròpia amb rendiment 98
11.6.10. Dimensions, pes i implantació 98
11.6.10.1. Comparació amb el cabal del circuit 99

11.7. Torre de refrigeració 99
11.7.1. Descripció del sistema de refrigeració 100
11.7.2. Dades de partida 100
11.7.3. Hipòtesis adoptades 101
11.7.4. Metodologia de càlcul pas a pas 101
11.7.4.1. Balanç tèrmic en cada servei 101
11.7.4.2. Cabal total que ha de circular per la torre 102
11.7.4.3. Potència tèrmica total a dissipar 102
11.7.4.4. Temperatura de retorn mesclat a la torre 103
11.7.4.5. Conversió de la càrrega a tones de refrigeració 103
11.7.4.6. Cabal en unitats de catàleg 103
11.7.4.7. Comprovació preliminar de viabilitat tèrmica 103
11.7.4.8. Estimació auxiliar de consum d'aigua 104
11.7.5. Selecció comercial de la torre 104
11.7.6. Resultats finals adoptats 105

11.8. Disseny dels tancs d'emmagatzematge 106
11.8.1. Disseny API 650 106
11.8.1.1. Disseny del fons 106
11.8.1.2. Disseny del cos 107
11.8.1.3. Disseny del sostre 109
11.8.2. Tanc d'emmagatzematge metanol 112
11.8.3. Tanc d'emmagatzematge formaldehid 115
11.8.4. Càlcul de distàncies de seguretat de l'emmagatzematge 119
11.8.4.1 Distància al límit de propietat tancs metanol 119
11.8.4.2. Càlcul de dimensionament de la cubeta tancs metanol 119
11.8.4.3. Dades de partida 119
11.8.4.4. Càlcul de la superfície necessària 119
11.8.4.5. Determinació de les dimensions geomètriques 119
11.8.4.6. Verificació de la capacitat neta 120
11.8.7. Distància al límit de propietat tancs formaldehid 120

11.9. Disseny de la columna d'absorció 120

11.10. Disseny de la columna de destil·lació 128
11.10.1. Simulació Short-Cut 129
11.10.2. Disseny rigorós de les columnes de destil·lació 131
11.10.3. Disseny dels Internals 134
11.10.4. Aplicació del codi ASME al disseny de les columnes 136
11.10.4.1. Determinació de la pressió i temperatura de disseny 137
11.10.4.2. Càlcul del gruix de la virolla 138
11.10.4.3. Càlcul del gruix dels capçals 139
11.10.4.4. Càlcul de l'alçada total de les columnes 141
11.10.4.5. Càlcul del pes de les columnes 143

11.11. Disseny del tanc pulmó TP-301 145
11.11.1. Pressió de disseny 146
11.11.2. Temperatura de disseny 147

11.11.3. Espessor del tanc pulmó 147
11.11.4. Espessor capçal 148
11.11.5. Diàmetre extern del tanc pulmó 150
11.11.6. Dimensions capçal 150
11.11.7. Alçada total del tanc pulmó 151
11.11.8. Pes del tanc buit 151

11.12. Disseny dels mescladors 152
11.12.1. Disseny mesclador estàtic M-201 152
11.12.2. Disseny mesclador estàtic M-301 156

11.13. Disseny de canonades 157
11.13.1. Dimensionament de canonada 158
11.13.2. Pèrdua de pressió 160

11.14. Càlcul de bombes i compressors 163
11.14.1. Dimensionament de les bombes 163
11.14.1.1 Càlcul del NPSH disponible 163
11.14.1.2. Càlcul de la càrrega de la bomba 165
11.14.1.3. Càlcul de la potència de la bomba 166
11.14.2. Dimensionament dels compressors 167
11.14.2.1. Càlcul de la potència del compressor. 167

11.15. Bibliografia 168

}

11. Manual de càlculs

11.1. Disseny reactors Multitubulars Formox

11.1.1. Descripció procés

Aquest apartat desenvolupa de forma rigorosa i completa, equació per equació, el disseny i la simulació a MATLAB d'un reactor industrial Formox. Es cobreixen tots els aspectes: la cinètica de reacció, els balanços de matèria i energia, el disseny geomètric i mecànic del recipient, la selecció de materials, el càlcul de gruixos per ASME, i la transferència de calor amb el fluid caloportador.

El reactor Formox és un reactor de llit fix catalític multitubular (PBR — Packed Bed Reactor), físicament idèntic a un intercanviador de calor de carcassa i tubs de gran escala. La configuració de planta consisteix en 2 unitats en paral·lel, per les raons operatives descrites en aquest apartat.

Taula 11.1. Resum disseny reactor

Tipus	Reactor catalític de llit fix multitubular (PBR)
Orientació	Vertical, flux descendent del gas
Costat tubs	Gas de procés (MeOH + O_2 + N_2) + catalitzador Fe-Mo
Costat carcassa	Therminol 66 en co-corrent amb el gas
Refrigeració	Indirecta, a través de la paret dels tubs
Règim tèrmic	No isotèrmic, no adiabàtic
Model fluidodinàmic	Flux pistó 1D (PFR ideal)

11.1.2. Reaccions i termodinàmica

- **Reacció R1 — Oxidació parcial de metanol (desitjada)**

$$CH_3OH + ½\ O_2 \rightarrow HCHO + H_2O \quad \Delta Hr_1 = -150\ kJ/mol$$

La reacció R1 és fortament exotèrmica i pràcticament irreversible a les temperatures d'operació (553–625 K). L'energia lliure de Gibbs és ΔG°r1 ≈ –135 kJ/mol a 298 K.

- **Reacció R2 — Sobreoxidació del HCHO (no desitjada)**

$$HCHO + ½\ O_2 \rightarrow CO + H_2O \qquad \Delta Hr_2 = -244\ kJ/mol$$

La reacció R2 és una reacció seriada que actua sobre el producte de R1. Crea un compromís fonamental: temperatures altes → X alta, però R2 ràpida → S baixa. L'objectiu és maximitzar X × S.

L'esquema és: MeOH →(R1)→ HCHO →(R2)→ CO. Les dues reaccions comparteixen el O_2 com a reactant, per la qual cosa la cinètica de R2 depèn del θ O_2, igual que R1. El control de la temperatura permet desactivar R2 sense sacrificar excessivament R1.

11.1.3. Catalitzador Fe-Mo

11.1.3.1. Composició i propietats

Taula 11.2. Propietats catalitzador Fe-Mo

Fase activa	$Fe_2(MoO_4)_3$ + excés de MoO_3
Ràtio Mo/Fe atòmic	2,2
Forma física	Pèl·lets cilíndrics o anells, 4–6 mm
Diàmetre de partícula d p	4,5 mm
Densitat aparent del llit ρ b	850 kg cat/m^3
Porositat del llit ε	0,45
T màxima admissible	380 °C
Vida útil	12–24 mesos

11.1.3.2. Mecanisme Mars-vam Krevelen

La selectivitat del catalitzador Fe-Mo s'explica pel mecanisme de Mars-van Krevelen (MvK): l'oxigen que s'incorpora al producte prové de la xarxa cristal·lina del catalitzador (Mo^{6+}=O), no del O_2 gasós directament [16].

- **Etapa 1 — Adsorció del MeOH sobre el lloc Mo^{6+}:**

$$CH_3OH(g) + Mo^{6+}{=}O \rightarrow CH_3O{-}Mo + OH$$

- **Etapa 2 — Deshidrogenació i formació de HCHO:**

$$CH_3O{-}Mo \rightarrow HCHO(g) + H{-}Mo$$

- **Etapa 3 — Reoxidació del catalitzador:**

$$Mo^{4+} + \tfrac{1}{2}\, O_2(g) \rightarrow Mo^{6+}{=}O$$

Cal un gran excés de O_2 per regenerar el catalitzador (ràtio O_2/MeOH = 2,5 vs. estequiomètric 0,5). Si el O_2 escasseja, el catalitzador es desactiva per reducció del Mo.

11.1.3.3. Desactivació

Tres mecanismes de desactivació: (1) sinterització tèrmica per T > 380 °C; (2) sublimació del MoO_3 en presència de H_2O; (3) pèrdua lenta de Mo per volatilització. Per evitar-los: controlar el hotspot < 380°C i mantenir ràtio O_2/MeOH > 2.

11.1.4. Bases del disseny i dades d'alimentació

Taula 11.3. Dades alimentació total (dos reactors)

Component	F (kmol/h)	mol/s	y_i (%)	kg/h
MeOH	166,00	46,11	7,79	5.319,0
O_2	412,86	114,68	19,37	13.211,1
N_2	1.553,14	431,43	72,84	43.509,7
TOTAL	2.132,00	592,22	100,00	62.039,8

- **Per reactor:**

Taula 11.4. Dades alimentació per reactor

F_MeOH	83,00 kmol/h = 23,06 mol/s
F_O_2	206,43 kmol/h = 57,34 mol/s
F_N_2	776,57 kmol/h = 215,71 mol/s
F_total	1.066 kmol/h = 296,11 mol/s

11.1.4.1. Verificació del LIE (Límit Inferior d'explosivitat)

La barreja MeOH/aire és explosiva entre el 8,5% i el 44% molar en MeOH (LIE/LSE a 280°C, 1,5 bar) [17]. Cal verificar que operem sota el LIE:

$$y_MeOH = F_MeOH / F_total = 83{,}00 / 1.066{,}00 = 0{,}0779 = 7{,}79\%$$

$$y_MeOH = 7{,}79\% < LIE = 8{,}5\% \rightarrow OPERACIÓ\ SEGURA$$

Marge de seguretat: 0,71 pp (8% relatiu).

11.1.4.2. Condicions d'operació

Taula 11.4. Condicions d'operació

T entrada gas T_0	280 °C = 553,15 K
T entrada Therminol Tc_0	265 °C = 538.15 K
P entrada gas P_0	1,60 bar = 1.60 × 10^5 Pa
P operació Therminol	3,0 bar (entrada carcassa)
Cabal màssic Therminol	50 kg/s = 180 t/h per reactor
T disseny costat tubs	420 °C
T disseny carcassa	350 °C
P disseny (ambdós costats)	4 bar

11.1.4.3. Justificació temperatura de disseny

Les temperatures de disseny no provenen d'un càlcul sinó d'una decisió d'enginyeria. S'aplica el criteri:

$$T_disseny \;=\; T_màx_operació \;+\; marge \;\rightarrow\; arrodoniment\ per\ excés$$

$$Costat\ tubs{:}\ T_hotspot \;=\; 352{,}8°C \;+\; marge\ {\sim}70°C \;\rightarrow\; 420°C\ (tensió\ admissible\ SA-213\ TP316L\ adequada).$$

$$Carcassa{:}\ T_sortida\ T66 \;=\; 292°C \;+\; marge\ {\sim}58°C \;\rightarrow\; 350°C\ (\approx\ T_màx_ús\ T66 \;=\; 345°C \;+\; 5°C\ de\ guarda)$$

11.1.4.4. Justificació 2 reactors en paral·lel

- **Operabilitat:** si un reactor s'atura per manteniment o canvi de catalitzador, l'altre manté el 50% de la producció.
- **Capacitat:** per a produccions >60.000 t/any, la configuració de 2 reactors és la pràctica industrial estàndard [14].
- **Fabricació i transport:** un reactor únic per a 156 kmol/h requeriria D > 5 m i M > 100 t.

11.1.5. Cinètica de reacció – Model LH (Deshmukh)

11.1.5.1. Tipus de model cinètic

La cinètica del procés Formox segueix un model heterogeni de Langmuir-Hinshelwood (LH), on la velocitat de reacció depèn de la cobertura superficial dels reactants sobre el catalitzador. Les assumpcions del model són: llocs actius idèntics; adsorció tipus Langmuir; la reacció té lloc entre espècies adsorbides; no hi ha limitació per difusió externa ni interna (simplificació del model 1D). Els paràmetres provenen de Deshmukh et al. (2005) [18].

11.1.5.2. Expressions cinètiques

Les velocitats de les dues reaccions s'expressen en mol per kg de catalitzador per segon:

$$r_1 \;=\; k_HCHO \;\cdot\; \theta_MeOH \;\cdot\; \theta_O_2 \quad [mol/(kg_cat \cdot s)]$$
$$r_2 \;=\; k_CO \;\cdot\; P_HCHO \;\cdot\; \theta_O_2 \quad [mol/(kg_cat \cdot s)]$$

On θ_i són cobertures superficials (adimensionals, 0 ≤ θ ≤ 1) i P_HCHO és la pressió parcial del formaldehid en atm.

11.1.5.3. Cobertures superficials (Langmuir)

Per al metanol, amb inhibició competitiva per el H_2O produïda:

$$\theta_{MeOH} = \frac{(K_{MeOH} \cdot P_{MeOH})}{1 + K_MeOH \cdot P_MeOH + K_H_2O \cdot P_H_2O)}$$

On les pressions parcials P_i s'expressen en atm. La inhibició per H_2O és progressiva: a mesura que avança la reacció i s'acumula H_2O, θ_MeOH disminueix, alentint R1 i reduint el risc de runaway tèrmic.

Per a l'oxigen, amb adsorció dissociativa (el O_2 molecular es trenca en dos àtoms O):

$$\theta_O_2 = (K_O_2 \cdot \sqrt{P_O_2}) / (1 + K_O_2 \cdot \sqrt{P_O_2})$$

La forma amb $\sqrt{P_O_2}$ reflecteix el mecanisme d'adsorció dissociativa que és consistent amb el cicle Mars-van Krevelen del catalitzador Fe-Mo.

11.1.5.4. Dependència d'Arrhenius

Totes les constants cinètiques k_i i els coeficients d'adsorció K_i varien amb la temperatura seguint la llei d'Arrhenius:

$$k_i(T) = A_i \cdot exp(-E_i / (R_g \cdot T)) \quad [R_g = 8{,}314\, J/(mol \cdot K)]$$

El signe de l'energia d'activació E_i determina el comportament tèrmic:

- **E > 0 (velocitats k_HCHO, k_CO):** la constant augmenta amb T → les reaccions s'acceleren en augmentar T.
- **E < 0 (adsorcions K_MeOH, K_O_2, K_H_2O):** la constant disminueix amb T → les cobertures baixen en augmentar T (adsorció exotèrmica).

11.1.5.5. Taula de paràmetres

Taula 11.5. Paràmetres cinètics

Paràmetre	A (factor pre-exp.)	E (J/mol)	Unitats
K_MeOH	$2{,}6 \times 10^{-4}$	–56.780	atm^{-1}
K_O_2	$1{,}423 \times 10^{-5}$	–60.320	$atm^{-1/2}$
K_H_2O	$5{,}5 \times 10^{-7}$	–86.450	atm^{-1}
k_HCHO	$1{,}5 \times 10^{7}$	+86.000	mol/(kg·s)
k_CO	$3{,}5 \times 10^{2}$	+46.000	mol/(kg·s·atm)

11.1.6. Balanços de matèria en un PBR 1D

11.1.6.1. Model PBR 1D

Es modela cada tub com un reactor de flux pistó (PFR) ideal, on el catalitzador omple l'interior. Assumpcions del model [19]:

- **Flux pistó 1D:** gradients només en direcció axial (z), no radials ni angulars.
- **No hi ha dispersió axial** (nombre de Peclet Pe → ∞).
- **Equilibri tèrmic local:** T_gas = T_sòlid_cat a cada secció (no hi ha gradient intrapartícula).
- **Estat estacionari:** ∂/∂t = 0.
- **Tubs idèntics:** distribució uniforme del cabal entre els 4.200 tubs.

11.1.6.2. Variable independent: massa de catalitzador W

En lloc de la posició axial z, la variable independent emprada al model MATLAB (excepte a la representació dels perfils) és la massa de catalitzador W (kg cat). Aquesta formulació és estàndard en disseny de PBR perquè la taxa de reacció s'expressa per unitat de massa de catalitzador.

La relació entre W i z és:

$$z\,[m] \;=\; W \,/\, (\rho_b \;\cdot\; A_t)$$

On ρ_b = 850 kg cat/m^3 és la densitat aparent del llit i A_t = 4,76 m^2 és l'àrea transversal total dels tubs.

11.1.6.3. Equació diferencial general

$$dF_i \,/\, dW \;=\; \Sigma_j\, \nu_{ij} \;\cdot\; r_j \quad [mol/s \,/\, kg_cat]$$

On v_ij és el coeficient estequiomètric del component i en la reacció j (negatiu per a reactants, positiu per a productes).

11.1.6.4. Equacions per component

Taula 11.6. Equacions cinètiques per component

$dF_MeOH \,/\, dW \;=$	$-\,r_1$	(MeOH és reactant de R1)
$dF_O_2 \,/\, dW \;=$	$-\,½\,(r_1 + r_2)$	(O_2 és reactant de R1 i R2, v = –½)
dF_HCHO / dW =	$+\,r_1 - r_2$	(producte R1, reactant R2)
$dF_H_2O \,/\, dW \;=$	$+\,r_1 + r_2$	(producte de R1 i R2)
dF_CO / dW =	$+\,r_2$	(producte de R2)
$dF_N_2 \,/\, dW \;=$	0	(inert — no reacciona)

11.1.6.5. Conversió i selectivitat

$$X_MeOH \;=\; (F_MeOH,0 \;-\; F_MeOH) \,/\, F_MeOH,0$$

$$S_HCHO \;=\; F_HCHO \,/\, (F_MeOH,0 \;-\; F_MeOH)$$

$$Rendiment\; Y \;=\; X_MeOH \;\cdot\; S_HCHO$$

Amb els resultats del MATLAB:

$$X_MeOH \;=\; (83.00 \;-\; 0.657) \,/\, 83.00 \;=\; 0.9921 \;\; (99.21\%)$$

$$S_HCHO \;=\; 78.414 \,/\, 82.343 \;=\; 0.9523 \;\; (95.23\%)$$

$$Y \;=\; 0.9921 \;\times\; 0.9523 \;=\; 0.9447 \;\; (94.47\%)$$

11.1.7. Balanç d'energia

11.1.7.1. Plantejament

Les dues reaccions alliberen calor (ΔHr_1 = –150 kJ/mol, ΔHr_2 = –244 kJ/mol). Si tota la calor es quedés al gas, la temperatura pujaria de forma descontrolada (adiabàtic). Per controlar-la, la calor s'evacua a través de la paret dels tubs cap al Therminol 66 [20]. El balanç d'energia diferencial és:

$$dT/dW \;=\; (Q_rxn \;-\; Q_cool) \,/\, \Sigma(F_i \cdot Cp_i)$$

11.1.7.2. Terme de generació de calor

La calor generaa per les reaccions per unitat de massa de catalitzador:

$$Q_{rxn} = \; (-\Delta Hr^1) \cdot r^1 + \; (-\Delta Hr^2) \cdot r^2 = \; 150.000 \; \cdot r^1 + \; 244.000 \; \cdot r^2 \;\; \left[\frac{W}{kg_{cat}}\right]$$

11.1.7.3. Terme extracció de calor

La calor extreta cap al Therminol 66 per unitat de massa de catalitzador:

$$Q_cool \;=\; U \;\cdot\; a_t \;\cdot\; (T_gas \;-\; Tc) \;\; [W/kg_cat]$$

11.1.7.4. Capacitat calorífica mescla

Cada component gasós té un Cp(T) polinòmic (NIST [21]):

$$Cp_i(T) \;=\; a_i \;+\; b_i \cdot 10^{-3} \cdot T \;+\; c_i \cdot 10^{-6} \cdot T^2 \;\; [J/(mol \cdot K)] \;\; (T \; en \; K)$$

Taula 11.7. Capacitat calorífica components

Component	a_i	b_i	c_i
MeOH	39,71	89,80	–52,97
O_2	25,48	15,20	–2,17
HCHO	22,73	53,35	–15,85

Component	a_i	b_i	c_i
H_2O	30,09	6,83	0,56
CO	28,16	1,68	–0,17
N_2	29,11	5,82	–0,82

11.1.7.5. Resultats del balanç

Taula 11.8. Resultats tèrmics reactor

T entrada gas T_0	$\mathbf{280°C \rightarrow 553,15\ K}$
T hotspot (màxim de T_gas)	$352{,}8\ °C\ en\ z = 0{,}269\ m\ (\Delta T = +72{,}8°C)$
Marge fins al límit del catalitzador	$380 - 352{,}8 = 27{,}2\ °C$
T sortida gas	$300{,}8\ °C\ (> T_0\ per\ efecte\ co-corrent)$

11.1.8. Balanç d'energia Therminol 66

11.1.8.1. Equació diferencial

El Therminol circula en co-corrent amb el gas (ambdós en la mateixa direcció, de dalt a baix). El seu balanç d'enegia és simple: tota la calor extreta del gas s'absorbeix com a calor sensible (no canvi de fase):

$$dTc/dW = Q_cool\ /\ (\dot{m}_c \cdot Cp_c)$$

11.1.8.2. Propietats del Therminol 66

Les propietats del Therminol 66 es calcula amb les fórmules d'Eastman Chemical [22]. La fórmula clau per al Cp és:

$$Cp\ [J/(kg \cdot K)] = (1{,}4651 + 0{,}003877 \cdot T) \times 1.000 \quad (T\ en\ °C)$$

Taula 11.9. Propietats Therminol 66

Propietat	Entrada 265°C	Sortida 292°C	Valor mig
Cp [J/(kg·K)]	2 493	2 604	2 550
ρ [kg/m³]	863	840	848
μ [mPa·s]	0,62	0,51	0,54
k [W/(m·K)]	0,1044	0,1018	0,103
P_vapor [bar]	0,025	0,055	—

11.1.8.3 Càlcul del ΔTc i calor evacuat

El càlcul de la calor evacuat des dels tubs on hi ha el fluid reactiu cap al refrigerant es calcula de la següent forma:

$$\Delta Tc = Q_total / (\dot{m}_c \cdot Cp_c) = 3.47 \times 10^6 / (50 \times 2550) = 27{,}2\ °C$$

$$T_sortida\ T66 = 265{,}0 + 27{,}2 = 292{,}2\ °C$$

$$Q_total = \dot{m}_c \cdot Cp_c \cdot \Delta Tc = 50 \times 2550 \times 27{,}2 = 3{,}47\ MW\ per\ reactor$$

11.1.9. Caiguda de pressió al llit (Ergun)

11.1.9.1. Equació d'Ergun

La caiguda de pressió en un llit empaquetat es calcula amb l'equació d'Ergun (1952) [23], que combina el règim viscós (Kozeny-Carman) i l'inercial (Burke-Plummer):

$$-dP/dz = [150(1-\varepsilon)^2/\varepsilon^3] \cdot \mu_g \cdot u/d_p^2 + [1{,}75(1-\varepsilon)/\varepsilon^3] \cdot \rho_g \cdot u^2/d_p$$

On u és la velocitat superficial del gas, ε = 0,45 la porositat, d_p = 0.0045 m el diàmetre de partícula, μ_g = 3,2×10^{-5} Pa·s la viscositat del gas.

11.1.9.2. Conversió a la variable W

Per a mesurar la caiguda de pressió en funció de W, es fa servir la següent equació:

$$dP/dW = (dP/dz) / (\rho_b \cdot A_t)$$

11.1.9.3. Càlcul a l'entrada del reactor

- **Velocitat volumètrica (gas ideal):**

$$Q_vol = F_T \cdot R_g \cdot T / P = 296{,}11 \times 8{,}314 \times 553{,}15 / 160\,000 = 8{,}50\, m^3/s$$

$$u_0 = Q_vol / A_t = 8{,}50 / 4{,}76 = 1{,}79\, m/s$$

- **Densitat del gas (pes molecular mig ≈ 29 g/mol):**

$$\rho_g = P \cdot MW/(R_g \cdot T) = 160\,000 \times 0{,}029 / (8{,}314 \times 553{,}15) = 1{,}009\, kg/m^3$$

- **Terme viscós (Kozeny-Carman):**

$$T_vis = 150 \times (0{,}55)^2/(0{,}45)^3 \times 3{,}2 \times 10^{-5} \times 1{,}79 / (0{,}0045)^2 = 3{,}96 \times 10^4\, Pa/m$$

- **Terme inercial (Burke-Plummer):**

$$T_iner = 1{,}75 \times 0{,}55/(0{,}45)^3 \times 1{,}009 \times (1{,}79)^2 / 0{,}0045 = 1{,}08 \times 10^3\, Pa/m$$

Contribució del terme inercial: 1080/(39600+1080) = 2,6% → terme viscós dominant (97%).

- **Nombre de Reynolds de partícula:**

$$Re_p = \rho_g \cdot u \cdot d_p / \mu_g = 1{,}009 \times 1{,}79 \times 0{,}0045 / 3{,}2 \times 10^{-5} = 254$$

11.1.9.4. Resultats integrats (MATLAB)

Taula 11.10. Resultats pressions integrats a MATLAB

P entrada	1,600 bar
P sortida	1,4125 bar
ΔP llit	0,1875 bar
Perfil	Quasi lineal (vegeu §21)

11.1.10. Geometria dels tubs i del feix

11.1.10.1. Selecció dels tubs

Taula 11.11. Característiques tubs[24]

Diàmetre exterior De	44,5 mm = 0,0445 m
Diàmetre interior Di	38,0 mm = 0,038 m
Gruix de paret	(44,5–38,0)/2 = 3,25 mm
Longitud del llit L	1,80 m
Material	SA-213 TP316L (SS austenític)
Nombre de tubs Nt	4200

11.1.10.2 Disposició dels tubs

Els tubs es disposen en malla triangular equilàtera, que és la disposició que dona major densitat de tubs per unitat d'àrea de carcassa (~15% més que la quadrada)[25]. El pas de tubs és:

Taula 11.12. Disposició dels tubs

Pas entre tubs Pt	$\mathbf{56\ mm\ =\ 1,26\ \times\ De}$
Pas relatiu Pt/De	1,26

11.1.10.3. Àrea de pas del gas

Es procedeix amb el càlcul del àrea de pas del gas:

$$A_t = N_t \cdot \pi/4 \cdot Di^2 = 4200 \times \pi/4 \times (0{,}038)^2 = 4{,}76\, m^2$$

11.1.10.4. Volum del llit i massa de catalitzador

A continuació, es calcula el volum del llit i la massa de catalitzador:

$$V_b = A_t \cdot L = 4{,}76 \times 1{,}80 = 8{,}57\, m^3$$

$$W_tot = \rho_b \cdot V_b = 850 \times 8{,}57 = 7288\, kg_cat$$

11.1.10.5. Àrea específica de transferència de calor

L'àrea de transferència per unitat de massa de catalitzador (referida a la superfície interna dels tubs):

$$a_t = 4 \,/\, (\rho_b \cdot Di) = 4 \,/\, (850 \times 0{,}038) = 0{,}1238\, m^2/kg_cat$$

- **Demostració:**

$$a_t = (Nt \cdot \pi \cdot Di \cdot L)/(\rho_b \cdot At \cdot L) = \pi \cdot Di/(\rho_b \cdot \pi/4 \cdot Di^2) = 4/(\rho_b \cdot Di)$$

11.1.10.6. Velocitat del gas

Un paràmetre clau en el disseny del reactor, es la velocitat del gas durant el procés de pas a través d'aquest:

$$u_entrada = 8{,}50 \,/\, 4{,}76 = 1{,}79\, m/s \;\; (superficial, z = 0)$$

$$u_sortida = 10{,}42 \,/\, 4{,}76 = 2{,}19\, m/s \;\; (superficial, z = 1{,}8m, T\ i\ moles\ majors)$$

$$u_inter = u_sup \,/\, \varepsilon = 1{,}79 \,/\, 0{,}45 = 3{,}98\, m/s \;\; (intersticial\ entre\ partícules)$$

11.1.11. Dimensionament del diàmetre de la carcassa

11.1.11.1. Mètode de Coulson & Richardson

El diàmetre del feix de tubs es calcula amb la correlació empírica de Coulson & Richardson [26]:

$$D_b = De \cdot (Nt \,/\, K_1)\text{^}(1/n_1)$$

On els coeficients K_1 i n_1 per a disposició triangular amb 1 pas de tubs són:

- $K_1 = 0{,}319$
- $n_1 = 2{,}142$

11.1.11.2. Càlcul del diàmetre del feix

A partir del mètode de Coulson & Richardson es calcula el diàmetre del feix:

$$D_b = 0{,}0445 \times (4.200 / 0{,}319)\text{^}(1/2{,}142) = 0{,}0445 \times (13.166)\text{^}(0{,}467)$$

$$D_b = 0{,}0445 \times 82{,}7 = 3.680\ mm$$

11.1.11.3. Holgura i diàmetre de la carcassa

S'afegeix una holgura de 70 mm entre el diàmetre exterior del feix i la carcassa (valor típic per a reactors de gran diàmetre amb feix extraïble):

$$Di_carcassa = D_b + 70 = 3{,}680 + 70 = 3.750\ mm$$

11.1.11.4. Verificació geomètrica

Per verificar, es comprova la fracció d'empaquetament:

$$\eta = \pi/(2\sqrt{3}) \cdot (De/Pt)^2 = 0{,}9069 \times (44{,}5/56)^2 = 0{,}573\ \ (57{,}3\%\ ocupat\ per\ tubs)$$

$$A_feix = Nt \times \pi/4 \times De^2 / \eta = 6{,}54 / 0{,}573 = 11{,}41\ m^2$$

$$D_feix = \sqrt{(4 \times 11{,}41/\pi)} = 3{,}81\ m \approx D_b\ calculat\ (3{,}68\ m)$$

11.1.11.5. Dimensions finals i proporcions

Ara sí, podem dimensionar el reactor:

$$H_total = L_cilindre + 2 \times h_capçal = 2\,200 + 2 \times 600 = 3400\ mm$$

$$D_int / H_total = 3750 / 3400 = 1{,}10\ \ (reactor\ quasi\ cúbic - típic\ Formox)$$

11.1.12. Capçals i tubesheets

11.1.12.1. Capçals elꞏlipsoidals 2:1

Els capçals elꞏlipsoidals 2:1 (relació semieix major/menor = 2:1) són l'estàndard industrial per a recipients a pressió perquè donen bona resistència mecànica amb gruixos moderats. L'alçada del capçal és:

$$h = Di/4 = 937{,}5\,mm$$

Taula 11.13. Característiques capçal elꞏlipsoidal

Tipus	Elꞏlipsoidal 2:1 (ASME)
Diàmetre interior	3 750 mm
Alçada útil del capçal	~600 mm (incloent la corona)
Material	SA-516 Gr.70
Quantitat	2 (capçal superior + inferior)

11.1.12.2. Tubesheets

Les tubesheets (plaques portants dels tubs) separen el costat gas (interior tubs) del costat Therminol (carcassa). Han de resistir la diferència de pressió, els esforços tèrmics i les forces dels tubs.

Taula 11.14. Característiques tubesheets

Gruix adoptat	80 mm
Material base	SA-266 Gr.2 (acer C forjat)
Revestiment (clad)	3 mm d'inoxidable SS316L per corrosió del gas
Justificació gruix	Règim constructiu: mín. 50–80 mm per D > 3 m

11.1.13. Selecció de materials

11.1.13.1. Criteris

Els criteris de selecció de materials per a un reactor catalític d'oxidació parcial a 280–380°C amb HCHO i H_2O són.[28]:

- Compatibilitat química amb el gas de procés (HCHO, àcids carboxílics en traces).
- Resistència mecànica a les temperatures de disseny.
- Soldabilitat i disponibilitat comercial.

Taula 11.15. Criteris selecció material[28]

Component	Material	Norma ASME	Justificació
Carcassa	SA-516 Gr.70	Sect. II Part A	Acer C per recipients pressió. T_max 425°C. Compatible amb T66.
Capçals	SA-516 Gr.70	Sect. II Part A	Igual que carcassa per soldabilitat directa.
Tubs	SA-213 TP316L	Sect. II Part A	SS austenític baix C. Resistent HCHO, àcids carboxílics, T fins 450°C.
Tubesheets	SA-266 Gr.2 + SS clad	Sect. II Part A	Base forjat C (resistència) + clad 3mm SS (corrosió gas).
Boques gas	SA-182 F316L	Sect. II Part A	SS per costat gas (corrosiu).
Boques T66	SA-105 (CS)	Sect. II Part A	Acer C suficient per costat T66 (no corrosiu).
Juntes	Grafit espiral metàl·lic	ASME B16.20	Resistent fins 540°C, gas àcids.

L'inox 316L resisteix la corrosió per àcid fòrmic (HCOOH, producte secundari de la sobreoxidació del HCHO) i pel formaldehid directament. La designació L (low carbon, C < 0.03%) prevé la sensibilització intergranular durant la soldadura, que podria causar corrosió en picadures. Comparativament, l'acer al carboni s'oxida ràpidament en presència de HCHO a 300°C.

11.1.14. Gruix de paret – ASME VIII Div.1

11.1.14.1. Marc normatiu

El càlcul del gruix de la carcassa segueix l'ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Section VIII, Division 1, apartat UG-27, vàlid per a cilindres de paret prima sota pressió interna [29]:

$$t = (P \cdot R) / (S \cdot E - 0.6 \cdot P) + CA$$

On:

- P = pressió de disseny
- R = radi interior
- S = tensió admissible del material a T_disseny
- E = eficiència de soldadura
- CA = sobre-gruix per corrosió.

11.1.14.2. Paràmetres de càlcul

Taula 11.16. Paràmetres de càlcul

P disseny	4 bar = 0,4 MPa
R = Di_carcassa / 2	3 750 / 2 = 1 875 mm = 1.875 m
Material	SA-516 Gr.70
T disseny carcassa	350 °C
S (ASME IID, Tabla 1A, 350°C)	138 MPa
E (soldadura amb radiografia)	1,0
CA (corrosió, 20 anys)	3 mm

11.1.14.3. Càlcul

Un cop obtinguts tots els paràmetres, es realitza el càlcul:

$$t = (0.4 \times 1\,875) / (138 \times 1.0 - 0.6 \times 0.4) + 3$$

$$t = 750 / 137.76 + 3 = 5.44 + 3$$

$$t_calculat = 8.44\,mm$$

11.1.14.4. Gruix mínim constructiu

Per a carcasses de gran diàmetre (D > 3 m), l'experiència industrial estableix un gruix mínim constructiu per a rigidesa estructural i capacitat de transport[13]:

- **t_min = 12 mm** (mínim industrial per D > 3 m)

11.1.14.5. Càlcul capçals el·lipsoidals

Per a capçals el·lipsoidals 2:1, ASME VIII Div.1 UG-32(d):

$$t_capçal = (P \cdot D) / (2 \cdot S \cdot E - 0.2 \cdot P) + CA$$

$$t_capçal = (0.4 \times 3\,750) / (2 \times 138 \times 1.0 - 0.2 \times 0.4) + 3 = 5.44 + 3 = 8.44\,mm$$

$$\rightarrow\ t_nominal_capçal = 12\,mm\ (consistent\ amb\ carcassa)$$

11.1.14.6. Gruix dels tubs

Els tubs SA-213 TP316L estan sotmesos a ΔP = 1,5 bar (diferència entre gas a 1,5 bar i T66 a 3 bar). El càlcul ASME dona un gruix mínim de només 0,07 mm. El gruix adoptat (3,25 mm, BWG 11) és molt superior al mínim per ser la mida comercial disponible i per resistir les forces longitudinals d'expansió tèrmica.

11.1.15. Pesos del reactor

11.1.15.1 Metodologia

El pes de cada component es calcula com: Pes = Volum de metall × densitat del material. La densitat dels materials usats és:

- SA-516 Gr.70 (acer C) = 7 850 kg/m^3;

- SA-213 TP316L (SS) = 7960 kg/m^3;
- Catalitzador Fe-Mo (ρ_bulk) = 850 kg/m^3;
- Therminol 66 a 280°C = 848 kg/m^3.

11.1.15.2. Carcassa cilíndrica

Es procedeix al càlcul de àrea del cilindre per a posteriorment obtenir el pes:

$$A_cilindre = \pi \times Di_s \times L_cil = \pi \times 3750 \times 2200 = 25{,}92\, m^2$$

$$P_cilindre = 25{,}92 \times 0.012 \times 7\,850 = 2\,441\, kg$$

11.1.15.3. Dos capçals el·lipsoidals

Es realitza el mateix càlcul per als capçals que amb la carcassa:

$$A_capçal = \pi \times Di_s^2 / 2 = \pi \times (3.75)^2 / 2 = 22{,}09\, m^2 \ per\ capçal$$

$$P_2_capçals = 2 \times 22{,}09 \times 0{,}012 \times 7\,850 = 4\,162\, kg$$

11.1.15.4. Feix tubular

Es procedeix a calcular el volum dels tubs per a obtenir el pes:

$$V_tub = \pi/4 \times (De^2 - Di^2) \times L = \pi/4 \times (0.0445^2 - 0.038^2) \times 1{,}80 = 7{,}624 \times 10^{-4}\, m^3$$

$$P_feix = 4200 \times 7{,}624 \times 10^{-4} \times 7960 = 25494\, kg$$

11.1.15.5. Tubesheets

Per al tubesheet es procedeix amb el mateix procés que amb la carcassa:

$$A_ts = \pi/4 \times (3{,}75)^2 = 11.045\, m^2$$

$$P_2_ts = 2 \times 11{,}045 \times 0{,}080 \times 7850 = 13872\, kg$$

11.1.15.6. Catalitzador

Per al catalitzador, degut a l'anterior obtenció de les dades necessàries es pot calcular directament:

$$P_cat = \rho_b \times V_b = 850 \times 8{,}57 = 7285\, kg$$

11.1.15.7. Therminol retingut a la carcassa

I per al Therminol retingut, es calcula el volum de Therminol a la carcassa per a treure el pes posteriorment:

$$V_T66 = (\pi/4 \times Di_s^2 - Nt \times \pi/4 \times De^2) \times L_cil + 2 \times V_capçal_T66$$

$$V_T66 \approx (11{,}04 - 6{,}54) \times 2{,}20 = 4{,}50 \times 2{,}20 = 9{,}90\, m^3$$

$$P_T66 = 9{,}90 \times 848 = 8395\, kg$$

11.1.15.8. Pes total en operació

Taula 11.17. Pesos totals reactor

Component	Material	Pes (kg)
Cilindre	SA-516 Gr.70	2441
Capçals × 2	SA-516 Gr.70	4162
Subtotal carcassa + capçals	—	6603
Feix tubular	SA-213 TP316L	25494
Tubesheets × 2	SA-266 + clad	13872
TOTAL ACER (BUIT)	—	45969
Catalitzador	Fe-Mo	7285
TOTAL EN OPERACIÓ (sense T66)	—	53254
Therminol 66 retingut	—	8395
TOTAL EN OPERACIÓ (amb T66)	—	61649

11.1.16. Volum del reactor

De la mateixa manera que s'ha calculat el pes del reactor, es calcula el volum del mateix.

11.1.16.1. Volum del cilindre

Per començar, es calcula el volum total del cilindre:

$$V_cilindre = \pi/4 \cdot Di_s^2 \cdot L_cil = \pi/4 \times (3{,}75)^2 \times 2{,}20 = 24{,}30\, m^3$$

11.1.16.2. Volum dels capçals elꞏlipsoidals 2:1

Fórmula per a un capçal elꞏlipsoidal 2:1 (h = Di/4):

$$V_capçal = (\pi/6) \cdot Di_s^2 \cdot h = (\pi/6) \times (3{,}75)^2 \times 0{,}9375 = 6{,}91\, m^3$$

$$V_2_capçals = 13{,}82\, m^3$$

11.1.16.3. Volum interior

Finalment, es pot obtenir el volum interior total del reactor:

$$V_interior = V_cilindre + 2 \cdot V_capçal = 24{,}30 + 13{,}82 = 38{,}12\, m^3$$

Taula 11.18. Volums totals reactor

Zona	Contingut	Volum (m^3)
Capçal superior	Plenum gas entrada	6,91
Cilindre — zona de tubs	Catalitzador + gas (11.78) + T66 (12.52)	24,30
Capçal inferior	Plenum gas sortida	6,91
TOTAL INTERIOR	—	38,12

11.1.17. Coeficient global de transferència de calor U

11.1.17.1. Definició i circuit de resistències

El coeficient global U integra les resistències tèrmiques en sèrie entre el gas i el Therminol. Referit a la superfície interior del tub [30]:

$$1/U_i = 1/h_i + (t_paret/k_paret) \cdot (Di/D_lm) + Di/(h_o \cdot De)$$

On:

$$D_lm = (De - Di)/ln(De/Di) = 0.0065/ln(1{,}171)$$
$$= 0{,}041\, m \text{ és el diàmetre mig logarítmic.}$$

11.1.17.2. Coeficient h_o (costat carcassa — Therminol)

Diàmetre hidràulic equivalent (disposició triangular):

$$D_h = 4 \times (\sqrt{3}/4 \times Pt^2 - \pi/8 \times De^2)/(\pi \times De/2)$$
$$= 4 \times (1{,}358 - 0{,}778) \times 10^{-3}/0{,}0699 = 33{,}1\ mm$$

Àrea lliure de la carcassa:

$$A_carc = \pi/4 \times Di_s^2 - Nt \times \pi/4 \times De^2 = 11{,}04 - 6{,}54 = 4{,}50\ m^2$$

$$u_T66 = 50/(820 \times 4{,}50) = 0{,}0136\ m/s$$

$$Re = 820 \times 0{,}0136 \times 0{,}0331/(5 \times 10^{-4}) = 737 \quad Pr = 5 \times 10^{-4} \times 2050/0{,}107$$
$$= 9{,}58$$

Correlació Dittus-Boelter:

$$Nu = 0{,}023 \times 737^{0{,}8} \times 9.58^{0{,}4} = 59{,}1 \rightarrow h_o = 59{,}1 \times 0{,}107/0{,}0331$$
$$= 191\ W/(m^2 \cdot K)$$

11.1.17.3. Coeficient h_i (gas en llit empaquetat)

La transferència de calor entre el llit catalític i la paret interior del tub és el terme limitant. Usant la correlació de Dixon (1988) [31]:

$$Nu_w = 0{,}6 \cdot Re_p^{0{,}5} \cdot Pr^{\frac{1}{3}}\ amb\ Re_p = 254, Pr_gas \approx 0{,}7$$

$$Nu_w \approx 0{,}6 \times 254^{0{,}5} \times 0{,}7^{\frac{1}{3}} = 8{,}5 \rightarrow h_i \approx 8{,}5 \times 0{,}04/0{,}038$$
$$\approx 90 - 150\ W/(m^2 \cdot K)$$

11.1.17.4. Resistència de la paret

$$k_paret\ (SS316L) = 15\ W/(m \cdot K)$$

$$t_paret/k_paret \times (Di/D_lm) = 0{,}00325/15 \times (0{,}038/0{,}041)$$
$$= 0{,}000201\ m^2K/W\ (negligible)$$

11.1.17.5. U global calculat

$$1/U = 1/150 + 0{,}000201 + 0{,}038/(191 \times 0{,}0445)$$
$$= 0{,}00667 + 0{,}000201 + 0{,}00447 = 0{,}01134$$
$$U_calculat \approx 88\ W/(m^2 \cdot K)$$

11.1.18. Rendiment i corrents del procés

11.1.18.1. Indicadors de rendiment

Taula 11.19. Indicadors de rendiment del reactor

Indicador	Valor	Unitats
X_MeOH	0,9921	—
S_HCHO	0,9523	—
X·S (rendiment global)	0,9447	—
F_HCHO per reactor	78,41	kmol/h
F_HCHO total (2 reactors)	156,83	kmol/h
Producció màssica	4708,9	kg/h
Producció diària	113	t/dia
Producció anual (330d)	37 294	t/any

11.1.18.2. Corrents per reactor

Taula 11.20. Corrents per reactor

Component	Entrada (kmol/h)	Sortida (kmol/h)	Entrada (kg/h)	Sortida (kg/h)
MeOH	83	0,657	2659,5	21,1
O_2	206,43	163,29	6 605,6	5225,2
HCHO	0	78,41	0	2354,4
H_2O	0	86,27	0	1554,2
CO	0	3,93	0	110,1
N_2	776,57	776,57	21754,8	21754,8
TOTAL	1066	1109,14	31019,9	31019,8

11.1.18.3. Corrents totals

Taula 11.21. Corrents totals ambdós reactors

Component	Entrada (kmol/h)	Sortida (kmol/h)	Entrada (kg/h)	Sortida (kg/h)
MeOH	166	1,314	5319,0	42,1
O_2	412,860	326,588	13211,1	10450,5
HCHO	0	156,827	0	4708,9
H_2O	0	172,544	0	3108,4
CO	0	7,859	0	220,1
N_2	1553,140	1553,140	43509,7	43509,7
TOTAL	2132	2218,272	62039,8	62039,7

11.1.19. Perfils axials

11.1.19.1. Perfil de cabals molars

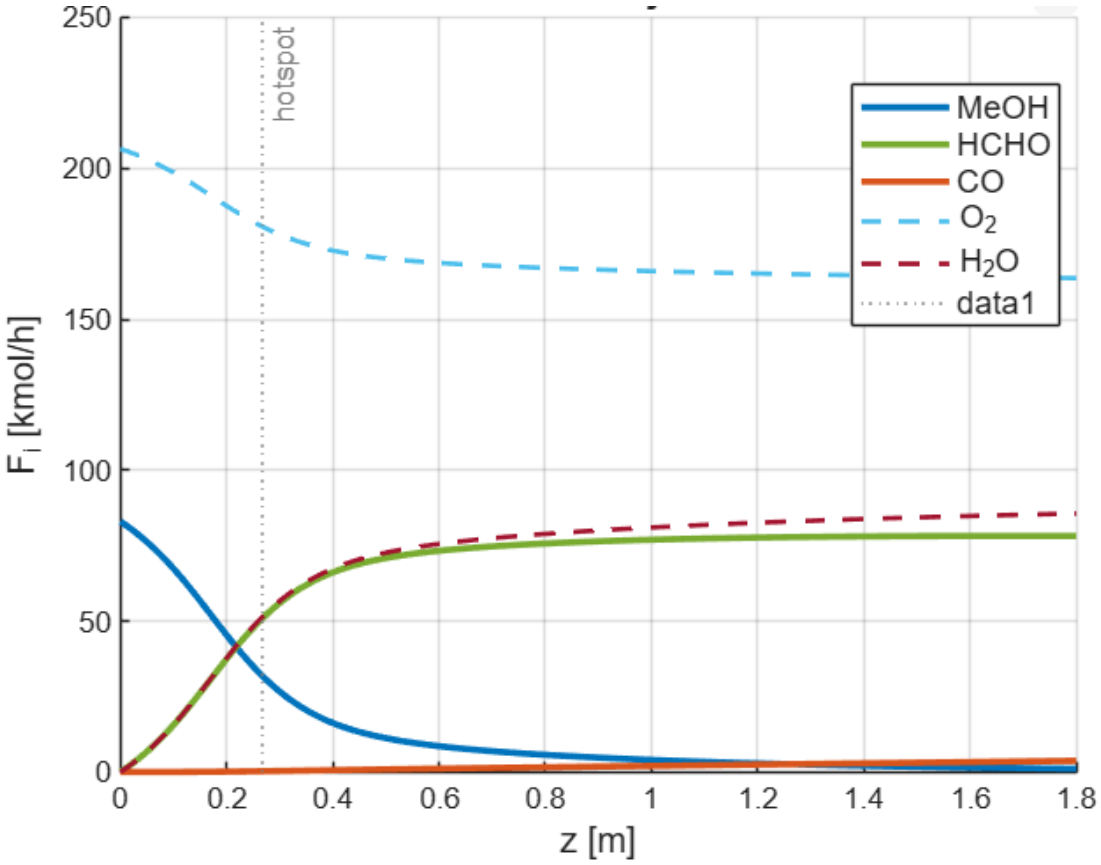


Figura 11.1. Perfil de cabals molars als reactors (en cojunt)

La Figura 11.1. mostra l'evolució dels cabals molars de tots els components de la mescla gas al llarg de la posició axial z del reactor (z = 0 entrada, z = 1,8 m sortida). La línia vertical puntejada marca la posició del hotspot (z ≈ 0,27 m). El N_2 no apareix a la Figura 1.11. perquè és inert i el seu cabal és constant (776,57 kmol/h, fora de l'escala).

- **MeOH (línia blava sòlida):**

Decreix de 83,0 a 0,66 kmol/h seguint una corba de tipus hiperbòlic. El pendent és màxim als primers 0,3 m del llit, coincidint amb la zona del hotspot on la temperatura és màxima i la concentració de MeOH és encara alta. A partir de z ≈ 0,8 m la corba s'aplana gairebé completament: El MeOH s'ha gairebé esgotat i la cinètica de Langmuir-Hinshelwood cau dràsticament perquè la cobertura θ_MeOH → 0. El 70% de la conversió total es produeix en els primers 0,15 m del llit (8% de la longitud).

- **HCHO (línia verda sòlida):**

Creix ràpidament de 0 fins a un màxim proper als 75 kmol/h cap a z ≈ 0,6–0,7 m, i s'estabilitza lleugerament fins a 78,41 kmol/h a la sortida. L'estabilització posterior reflecteix l'equilibri dinàmic entre la generació per R1 (que s'alenteix quan s'esgota el MeOH) i el consum per R2 (que actua sobre el HCHO acumulat). La corba de HCHO creua la de MeOH al voltant de z ≈ 0,25 m, just al hotspot: En aquest punt la meitat del MeOH ja s'ha convertit.

- **H_2O (línia vermella discontínua):**

Creix de 0 a 86.27 kmol/h, superant el HCHO en cabal molar a la sortida. Això és consistent amb l'estequiometria: El H_2O es genera a les dues reaccions (R1 i R2), per la qual cosa el seu cabal final és igual a la suma del MeOH consumit per R1 més el HCHO consumit per R2. El H_2O és l'inhibidor competitiu de la cinètica: la seva acumulació progressiva redueix la cobertura θ_MeOH i alenteix R1 a la segona meitat del reactor.

- **O_2 (línia cian discontínua):**

Decreix de 206,43 a 163,29 kmol/h de forma quasi lineal en la primera meitat i s'aplana a la segona. La disminució total és de 43,14 kmol/h, consistent amb l'estequiometria: ½ mol O_2 per mol de MeOH consumit a R1 i ½ mol O_2 per mol de HCHO consumit a R2. A la sortida queda un 79% del O_2 alimentat — el gran excés inicial (ràtio O_2/MeOH = 2,5) garanteix que el O_2 no sigui mai el reactant limitant ni comprometi la regeneració del catalitzador (cicle Mars-van Krevelen).

- **CO (línia taronja sòlida):**

Creix lentament i de forma quasi lineal de 0 a 3,93 kmol/h. La taxa de formació de CO és proporcional a r_2 = k_CO · P_HCHO · θ_O_2, que és màxima quan P_HCHO és màxima (z ≈ 0,6–0,8 m, on F_HCHO arriba al màxim). El pendent del CO és lleugerament superior a la zona central del reactor per aquesta raó. El CO representa la pèrdua de selectivitat: 3,93 kmol/h de HCHO que no arriben al producte final, equivalent al 4,77% de pèrdua de selectivitat respecte al 100% teòric.

La gràfica posa de manifest la naturalesa seriada de les reaccions R1 → R2. El HCHO és alhora producte (de R1) i reactant (de R2), per la qual cosa la seva corba presenta un màxim intermedi i no creix indefinidament. Operar amb una longitud de llit d'1,8 m permet arribar a X = 99,2% però al cost d'una selectivitat del 95,2% — la zona entre z = 0,8 i 1,8 m aporta poca conversió addicional però manté el HCHO exposat a R2 prou temps suficient per generar el CO observat.

11.1.19. 2 Perfil de temperatura

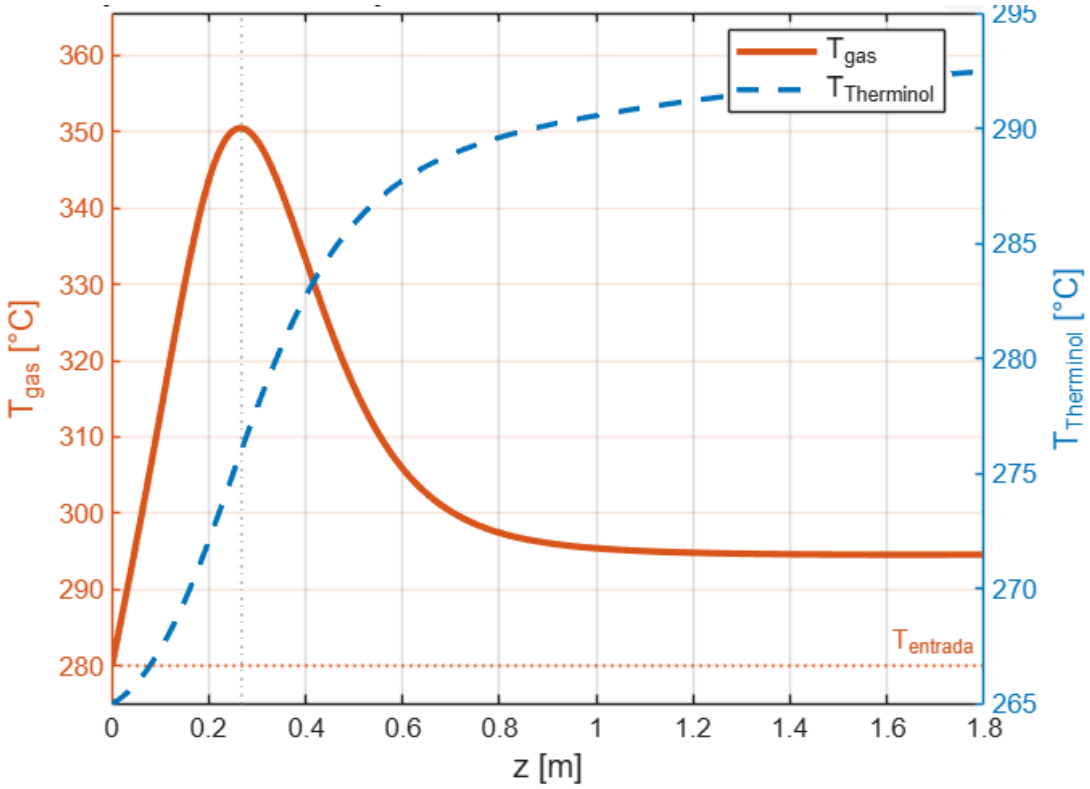


Figura 11.2. Perfil de temperatura als reactors

La figura mostra l'evolució de la temperatura del gas de procés T_gas (línia taronja sòlida, eix esquerre) i del Therminol 66 T_Therminol (línia blava discontínua, eix dret) al llarg de la posició axial z del reactor. La doble escala Y permet visualitzar simultàniament els dos perfils, que operen en rangs de temperatura diferents.

El perfil presenta la forma característica de pic agut seguida de descens suau, típica dels reactors d'oxidació exotèrmica catalítica:

- **Zona 1 — Pujada ràpida (z = 0 a 0,27 m):** a l'entrada del llit coincideixen la màxima concentració de MeOH i el Therminol al seu punt més fred (265°C), amb el màxim gradient de força motriu Q_rxn – Q_cool. La generació de calor per R1 és molt superior a l'extracció, per la qual cosa el gas puja de 280°C a 350,5°C en només el 15% de la longitud del llit.
- **Punt de hotspot (z ≈ 0,27 m):** el màxim de temperatura es produeix quan la velocitat de generació de calor (Q_rxn) i la d'extracció (Q_cool) s'igualen instantàniament. A partir d'aquest punt, el MeOH ja s'ha consumit majoritàriament i Q_rxn cau ràpidament.

- **Zona 2 — Descens i estabilització (z = 0,27 a 1,8 m):** el gas es refreda progressivament cap al valor de sortida (~295°C). La corba s'aplana entre z = 0,8 i 1,8 m, reflectint que la diferència de temperatura entre el gas i el Therminol es fa petita i l'extracció de calor s'alenteix.

El Therminol entra fred (265°C) i s'escalfa monotònicament fins a ~293°C a la sortida. La pendent de la seva corba és proporcional a la calor que rep del gas (Q_cool = U·at·(T_gas – T_T66)):

- **z = 0 a 0,4 m:** pendent màxim, perquè ΔT = T_gas – T_T66 és màxim en aquesta zona (el gas ja ha pujat però el T66 és encara fred).
- **z > 0,8 m:** el pendent s'aplana, el T66 s'acosta a la temperatura del gas i la transferència de calor disminueix.

El marge de 29,5°C entre el hotspot (350,5°C) i el límit del catalitzador (380°C) és l'indicador de seguretat tèrmica clau del disseny. Un marge inferior a 15–20°C requeriria revisar les condicions d'operació (T_0, cabal de T66 o U).

11.1.19. 3. Perfil de conversió i selectivitat axial

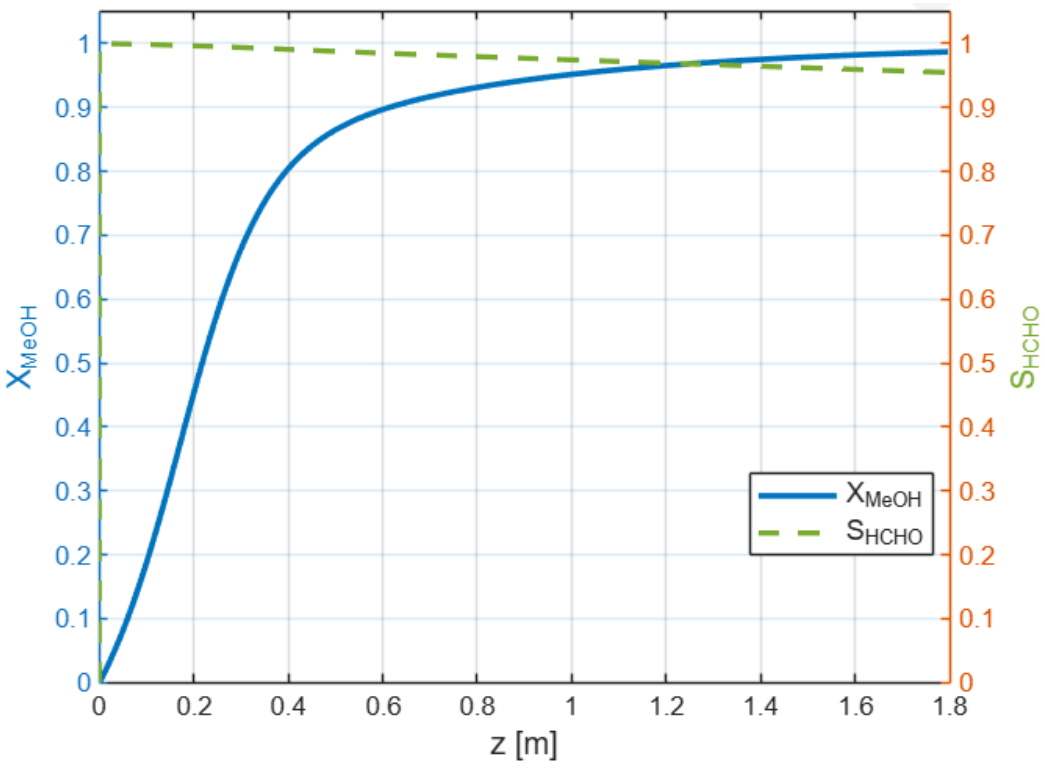


Figura 11.3. Perfil de conversió i selectivitat al reactor

La figura mostra l'evolució simultània de la conversió del metanol X_MeOH (línia blava sòlida, eix esquerre) i de la selectivitat al formaldehid S_HCHO (línia verda discontínua, eix dret) al llarg de la posició axial z del reactor.

La corba presenta una forma sigmoidal molt pronunciada. El pendent és màxim als primers centímetres del llit, on coincideixen la màxima concentració de MeOH i la temperatura de hotspot (352,8°C a z = 0,27m).

A z > 1,0 m la corba s'aplana notablement. Això és una conseqüència directa de la cinètica de Langmuir-Hinshelwood: quan P_MeOH → 0, la cobertura superficial θ_MeOH → 0 i la velocitat de R1 cau exponencialment.

La selectivitat comença a ~1,00 a l'entrada i decreix contínuament fins a 0,9523 a la sortida. La disminució és progressiva i no presenta cap punt d'inflexió brusc. Dos factors expliquen aquest comportament:

- **R2 actua mentre hi ha HCHO:** a mesura que el HCHO s'acumula al llit, la pressió parcial P_HCHO augmenta i la velocitat de R2 creix.
- **T alta manté R2 activa:** tot i que la temperatura baixa del hotspot (352,8°C) cap a la sortida (300,8°C), continua sent prou alta perquè k_CO sigui significatiu.

La gràfica il·lustra visualment el compromís entre conversió i selectivitat inherent a les reaccions en sèrie R1→R2. Augmentar X (allargant el llit o pujant la temperatura) inevitablement redueix S, perquè el HCHO acumulat té més temps i temperatura per reaccionar via R2. El punt de disseny escollit (X = 0,992, S = 0,952) representa un equilibri industrial acceptable: molt alta conversió per minimitzar el tractament del gas de cua, amb una selectivitat suficient per a la qualitat del producte.

11.1.19.4 Perfil de pressió axial

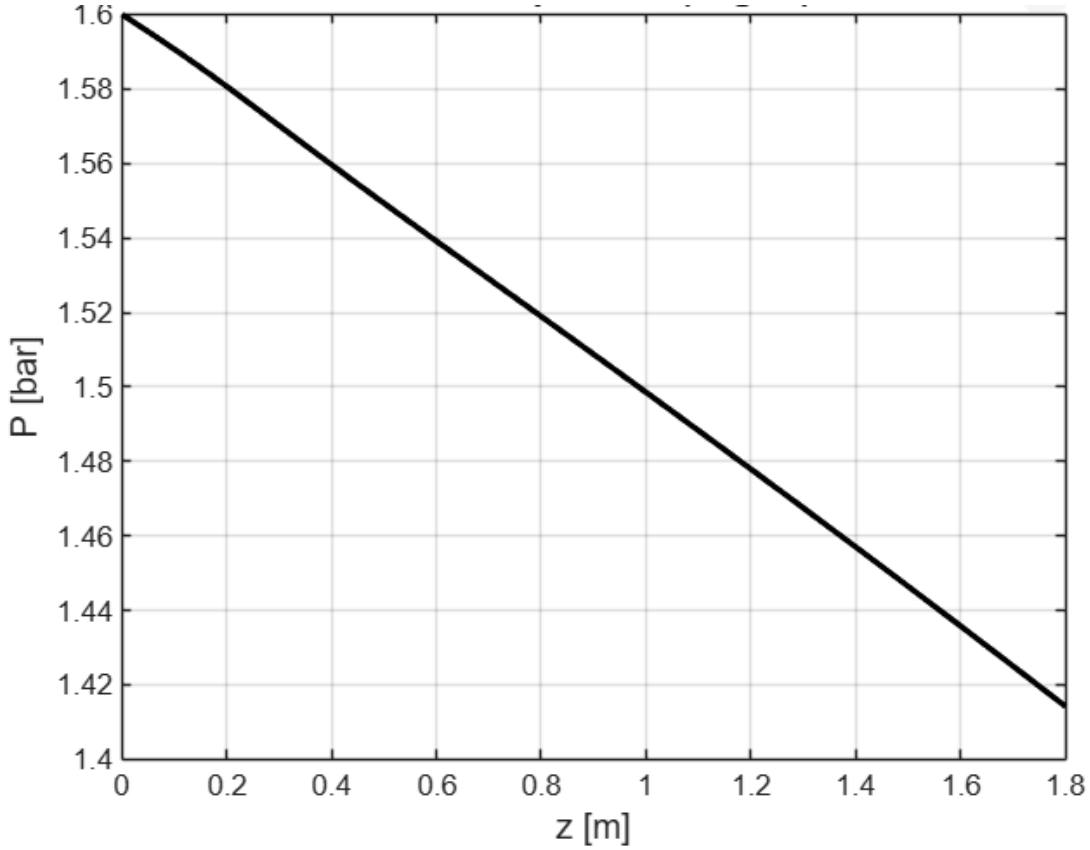


Figura 11.4. Perfil de pressió als reactors

La figura mostra l'evolució de la pressió del gas de procés al llarg de la posició axial z del reactor, des de l'entrada (z = 0 m) fins a la sortida (z = 1,8 m).

La pressió decreix de forma quasi lineal al llarg de tot el llit. Aquesta linealitat és el resultat de la compensació entre dos efectes oposats que es produeixen simultàniament al llarg del reactor:

- L'augment de temperatura del gas (de 280°C al hotspot de 352.8°C) incrementa el volum molar i, per tant, la velocitat superficial u — cosa que tendeix a augmentar la caiguda de pressió.
- La disminució de la pressió mateixa redueix la densitat del gas ρ_g — cosa que tendeix a reduir la caiguda de pressió.

Ambdós efectes es compensen aproximadament, donant una corba quasi recta.

La caiguda de pressió de 0,1875 bar és acceptable per al procés — representa una pèrdua del 11,7% de la pressió d'entrada (1,6 bar). Valors superiors a 0,3 bar requeririen

revisar la longitud del llit o el diàmetre de partícula. La pressió de sortida (1,4125 bar) és prou superior a la pressió atmosfèrica per garantir el flux del gas cap aigües avall de la instal·lació.

11.1.20. Codi de MATLAB

A continuació, adjunt el codi de MATLAB fet servir per a la simulació dels reactors:

```
% -- Alimentación total [kmol/h] --

%   Regla: y_MeOH < 8.5% (límite inferior explosividad)

F_MeOH0_tot = 166;     % kmol/h

F_O20_tot   = 412.86;    % kmol/h  (ratio O2/MeOH ≈ 2.5)

F_N20_tot   = 1553.14;   % kmol/h

% -- Cinética: factor de escala --

par.scale_r = 0.1;

% -- Geometría del reactor --

par.Nt    = 4200;

par.Di    = 0.038;       % m

par.L     = 1.80;        % m

par.eps   = 0.45;

par.rho_b = 850;         % kg cat/m^3

par.dp    = 0.0045;      % m

par.mu_g  = 3.2e-5;      % Pa·s (~280°C)

% -- Condiciones de operación --

par.T0   = 280 + 273.15;   % K ← Therminol 66: no pasar de 283°C

par.Tc0  = 265 + 273.15;   % K
```

```
par.P0   = 1.6e5;        % Pa

par.Rg   = 8.314;

par.atm  = 101325;

% -- Transferencia de calor: Therminol 66 --

par.U    = 200;        % W/(m²·K)

par.Cp_c   = 2550;       % J/(kg·K)  ← Therminol 66 a 270°C

par.mflow_c = 50;        % kg/s por reactor

%% ============================================================

% BLOQUE FIJO

%% ============================================================

nReactors = 2;

k2s = 1000/3600;

F_MeOH0 = F_MeOH0_tot / nReactors * k2s;

F_O20   = F_O20_tot   / nReactors * k2s;

F_HCHO0 = 0.0;

F_H2O0  = 0.0;

F_CO0   = 0.0;

F_N20   = F_N20_tot   / nReactors * k2s;

FT_feed  = F_MeOH0 + F_O20 + F_N20;

yMeOH_in = F_MeOH0 / FT_feed * 100;

if yMeOH_in > 8.5

   warning('y_MeOH = %.2f%% > 8.5%% — revisar limite de explosividad', yMeOH_in);
```

```
end

par.At  = par.Nt * pi * par.Di^2 / 4;

par.Vb  = par.At * par.L;

par.Wtot = par.rho_b * par.Vb;

par.at  = 4 / (par.rho_b * par.Di);

par.MW_MeOH = 32.042e-3;

par.MW_O2  = 31.999e-3;

par.MW_HCHO = 30.026e-3;

par.MW_H2O  = 18.015e-3;

par.MW_CO  = 28.010e-3;

par.MW_N2  = 28.014e-3;

par.dHr1 = -150e3;

par.dHr2 = -244e3;


par.Cp_MeOH = [39.71,  89.80, -52.97];

par.Cp_O2  = [25.48,  15.20,  -2.17];

par.Cp_HCHO = [22.73,  53.35, -15.85];

par.Cp_H2O  = [30.09,   6.83,   0.56];

par.Cp_CO  = [28.16,   1.68,  -0.17];

par.Cp_N2  = [29.11,   5.82,  -0.82];

par.A_KMeOH = 2.6e-4;   par.E_KMeOH = -56.78e3;

par.A_KO2  = 1.423e-5;  par.E_KO2  = -60.32e3;
```

```
par.A_KH2O  = 5.5e-7;    par.E_KH2O  = -86.45e3;

par.A_kHCHO = 1.5e7;     par.E_kHCHO =  86.00e3;

par.A_kCO   = 3.5e2;     par.E_kCO   =  46.00e3;

y0 = [F_MeOH0; F_O20; F_HCHO0; F_H2O0; F_CO0; F_N20;

    par.P0; par.T0; par.Tc0];

opts = odeset('RelTol',1e-7,'AbsTol',1e-9, ...

          'Events',@(W,y) stopEvents(W,y));

[Wsol, Ysol] = ode15s(@(W,y) reactorODE(W,y,par), ...

                [0, par.Wtot], y0, opts)

FMeOH = Ysol(:,1);  FO2  = Ysol(:,2);  FHCHO = Ysol(:,3);

FH2O  = Ysol(:,4);  FCO  = Ysol(:,5);  FN2   = Ysol(:,6);

P     = Ysol(:,7);  T    = Ysol(:,8);  Tc    = Ysol(:,9);

zsol  = Wsol / (par.rho_b * par.At);

XMeOH = (F_MeOH0 - FMeOH) / F_MeOH0;

Sel   = zeros(size(FMeOH));

mask  = (F_MeOH0 - FMeOH) > 1e-12;

Sel(mask) = FHCHO(mask) ./ (F_MeOH0 - FMeOH(mask));


[T_hot, idx_hot] = max(T);

z_hot = zsol(idx_hot);

%% ------------------------------------------------------

% Caudales salida por reactor [mol/s]
```

```
%% ------------------------------------------------------

FMeOH_out = FMeOH(end);

FO2_out   = FO2(end);

FHCHO_out = FHCHO(end);

FH2O_out  = FH2O(end);

FCO_out   = FCO(end);

FN2_out   = FN2(end);

FT_out    = FMeOH_out + FO2_out + FHCHO_out + FH2O_out + FCO_out + FN2_out;

FT_in     = F_MeOH0  + F_O20   + F_HCHO0   + F_H2O0   + F_CO0   + F_N20;

% Conversión a kmol/h (×3.6)

c = 3.6;

% Caudales másicos salida [kg/h] por reactor

mMeOH_in  = F_MeOH0   * par.MW_MeOH * 1e3 * c;

mO2_in    = F_O20     * par.MW_O2   * 1e3 * c;

mN2_in    = F_N20     * par.MW_N2   * 1e3 * c;

mTot_in   = mMeOH_in + mO2_in + mN2_in;

mMeOH_out = FMeOH_out * par.MW_MeOH * 1e3 * c;

mO2_out   = FO2_out   * par.MW_O2   * 1e3 * c;

mHCHO_out = FHCHO_out * par.MW_HCHO * 1e3 * c;

mH2O_out  = FH2O_out  * par.MW_H2O  * 1e3 * c;

mCO_out   = FCO_out   * par.MW_CO   * 1e3 * c;

mN2_out   = FN2_out   * par.MW_N2   * 1e3 * c;
```

```
mTot_out  = mMeOH_out + mO2_out + mHCHO_out + mH2O_out + mCO_out + mN2_out;

FHCHO_tot  = 2 * FHCHO_out * c;

FHCHO_kgh  = FHCHO_tot * par.MW_HCHO * 1e3;

prod_tday  = FHCHO_kgh * 24 / 1e3;

prod_tyear = prod_tday * 330;


gap_kmolh  = FHCHO_tot - PROD_TARGET;

gap_pct    = gap_kmolh / PROD_TARGET * 100;


%% ------------------------------------------------------------

% GRÁFICAS

%% ------------------------------------------------------------

cMeOH=[0.00 0.45 0.74]; cHCHO=[0.47 0.67 0.19]; cCO=[0.85 0.33 0.10];

cO2  =[0.30 0.75 0.93]; cH2O =[0.64 0.08 0.18];

cGas =[0.85 0.33 0.10]; cTc  =[0.00 0.45 0.74];


figure('Color','w','Name','Perfiles molares','NumberTitle','off');

hold on;

plot(zsol,FMeOH*3.6,'-', 'Color',cMeOH,'LineWidth',2.2,'DisplayName','MeOH');

plot(zsol,FHCHO*3.6,'-', 'Color',cHCHO,'LineWidth',2.2,'DisplayName','HCHO');

plot(zsol,FCO*3.6,  '-', 'Color',cCO,  'LineWidth',2.2,'DisplayName','CO');

plot(zsol,FO2*3.6,  '--','Color',cO2,  'LineWidth',1.6,'DisplayName','O_2');
```

```
plot(zsol,FH2O*3.6, '--','Color',cH2O, 'LineWidth',1.6,'DisplayName','H_2O');
xline(z_hot,':','Color',[.5 .5 .5],'LineWidth',1,'Label','hotspot');
grid on; legend('Location','best','FontSize',11);
xlabel('z [m]','FontSize',12); ylabel('F_i [kmol/h]','FontSize',12);
title('Perfiles de flujo molar','FontSize',13);
figure('Color','w','Name','Temperatura','NumberTitle','off');
yyaxis left
 plot(zsol,T-273.15,'-','Color',cGas,'LineWidth',2.5); hold on;
 xline(z_hot,':','Color',[.6 .6 .6],'LineWidth',1);
 yline(par.T0-273.15,':','Color',cGas,'LineWidth',1.2, ...
     'Label','T_{entrada}','LabelHorizontalAlignment','right');
 ylabel('T_{gas} [°C]','FontSize',12,'Color',cGas);
 ylim([min(T)-5-273.15, max(T)+15-273.15]);
 ax=gca; ax.YColor=cGas;
yyaxis right
 plot(zsol,Tc-273.15,'--','Color',cTc,'LineWidth',2.0);
 ylabel('T_{Therminol} [°C]','FontSize',12,'Color',cTc);
 ax2=gca; ax2.YColor=cTc;
xlabel('z [m]','FontSize',12); grid on;
legend({'T_{gas}','','','T_{Therminol}'},'Location','best','FontSize',11);
title(sprintf('Temperatura — Hotspot: %.1f°C  DeltaT=%.1f°C  en z=%.3f m', ...
         T_hot-273.15, T_hot-par.T0, z_hot),'FontSize',13);
```

```
figure('Color','w','Name','Conversion y selectividad','NumberTitle','off');
yyaxis left
 plot(zsol,XMeOH,'-','Color',cMeOH,'LineWidth',2.2);
 ylabel('X_{MeOH}','FontSize',12,'Color',cMeOH); ylim([0,1.05]);
yyaxis right
 plot(zsol,Sel,'--','Color',cHCHO,'LineWidth',2.0);
 ylabel('S_{HCHO}','FontSize',12,'Color',cHCHO); ylim([0,1.05]);
xlabel('z [m]','FontSize',12); grid on;
legend({'X_{MeOH}','S_{HCHO}'},'Location','best','FontSize',11);
title(sprintf('X_{MeOH}=%.4f  S_{HCHO}=%.4f  X·S=%.4f', ...
        XMeOH(end),Sel(end),XMeOH(end)*Sel(end)),'FontSize',13);
figure('Color','w','Name','Caida de presion','NumberTitle','off');
plot(zsol,P/1e5,'k-','LineWidth',2);
xlabel('z [m]','FontSize',12); ylabel('P [bar]','FontSize',12);
grid on; title('Perfil de presion (Ergun)','FontSize',13);
figure('Color','w','Name','Panel resumen','NumberTitle','off');
subplot(2,2,1);
 hold on;
 plot(zsol,FMeOH*3.6,'Color',cMeOH,'LineWidth',1.8);
 plot(zsol,FHCHO*3.6,'Color',cHCHO,'LineWidth',1.8);
 plot(zsol,FCO*3.6,  'Color',cCO,  'LineWidth',1.8);
 legend('MeOH','HCHO','CO','FontSize',9);
```

```
 grid on; xlabel('z [m]'); ylabel('kmol/h'); title('Flujos');
subplot(2,2,2);
 yyaxis left
  plot(zsol,T-273.15,'-','Color',cGas,'LineWidth',1.8);
  ylabel('T_{gas} [°C]','Color',cGas);
 yyaxis right
  plot(zsol,Tc-273.15,'--','Color',cTc,'LineWidth',1.8);
  ylabel('T_c [°C]','Color',cTc);
 grid on; xlabel('z [m]'); title('Temperatura');
subplot(2,2,3);
 yyaxis left
  plot(zsol,XMeOH,'-','Color',cMeOH,'LineWidth',1.8);
  ylabel('X_{MeOH}','Color',cMeOH); ylim([0,1.05]);
 yyaxis right
  plot(zsol,Sel,'--','Color',cHCHO,'LineWidth',1.8);
  ylabel('S_{HCHO}','Color',cHCHO); ylim([0,1.05]);
 grid on; xlabel('z [m]'); title('X y S');
subplot(2,2,4);
 hb = bar([FHCHO_tot, PROD_TARGET], 0.5);
 hb.FaceColor = 'flat';
 hb.CData(1,:) = cHCHO;
 hb.CData(2,:) = [0.8 0.8 0.8];
```

```
set(gca,'XTickLabel',{'Produccion','Objetivo'},'FontSize',11);
ylabel('kmol/h'); grid on; ylim([0, max(PROD_TARGET,FHCHO_tot)*1.15]);
text(1,FHCHO_tot+2, sprintf('%.1f',FHCHO_tot), ...
    'HorizontalAlignment','center','FontSize',11,'FontWeight','bold');
text(2,PROD_TARGET+2, sprintf('%.1f',PROD_TARGET), ...
    'HorizontalAlignment','center','FontSize',11,'Color',[0.5 0.5 0.5]);
if gap_kmolh >= 0
   title(sprintf('Prod. vs Objetivo  (%+.1f kmol/h)',gap_kmolh),'FontSize',11);
else
   title(sprintf('Prod. vs Objetivo  (%+.1f kmol/h)',gap_kmolh),'FontSize',11,'Color','r');
end
sgtitle(sprintf('Formox | scale\\_r=%.3f | Nt=%d | L=%.2fm | X=%.3f S=%.3f', ...
          par.scale_r, par.Nt, par.L, XMeOH(end), Sel(end)), 'FontSize',11);


%% =========================================================
% FUNCIONES LOCALES
%% =========================================================
function Cp = cpEval(c, T)
   Cp = c(1) + c(2)*1e-3*T + c(3)*1e-6*T^2;
end
function dydW = reactorODE(~, y, par)
   FMeOH=y(1); FO2=y(2); FHCHO=y(3);
```

```
FH2O =y(4); FCO=y(5); FN2  =y(6);

P=y(7); T=y(8); Tc=y(9)

FT = FMeOH+FO2+FHCHO+FH2O+FCO+FN2;

if FT<=0 || P<=1e4 || T<400

   dydW=zeros(9,1); return;

end

P_atm=P/par.atm;

PMeOH=(FMeOH/FT)*P_atm;  PO2=(FO2/FT)*P_atm;

PHCHO=(FHCHO/FT)*P_atm;  PH2O=(FH2O/FT)*P_atm;

KMeOH=par.A_KMeOH*exp(-par.E_KMeOH/(par.Rg*T));

KO2  =par.A_KO2  *exp(-par.E_KO2  /(par.Rg*T));

KH2O =par.A_KH2O *exp(-par.E_KH2O /(par.Rg*T));

kHCHO=par.A_kHCHO*exp(-par.E_kHCHO/(par.Rg*T));

kCO  =par.A_kCO  *exp(-par.E_kCO  /(par.Rg*T));

uMeOH=(KMeOH*PMeOH)/(1+KMeOH*PMeOH+KH2O*PH2O);

sqO2=sqrt(max(PO2,0));

uO2=(KO2*sqO2)/(1+KO2*sqO2);

r1=max(kHCHO*uMeOH*uO2,0)*par.scale_r;

r2=max(kCO  *PHCHO*uO2,0)*par.scale_r

dFMeOH=-r1;       dFO2=-0.5*(r1+r2);

dFHCHO= r1-r2;     dFH2O=r1+r2;

dFCO  = r2;       dFN2=0;
```

```
  SumFCp=FMeOH*cpEval(par.Cp_MeOH,T)+FO2*cpEval(par.Cp_O2,T)+ ...
      FHCHO*cpEval(par.Cp_HCHO,T)+FH2O*cpEval(par.Cp_H2O,T)+ ...
      FCO*cpEval(par.Cp_CO,T)+FN2*cpEval(par.Cp_N2,T);
  Q_rxn =(-par.dHr1)*r1+(-par.dHr2)*r2;
  Q_cool=par.U*par.at*(T-Tc);
  dT_dW =(Q_rxn-Q_cool)/SumFCp;
  dTc_dW=Q_cool/(par.mflow_c*par.Cp_c);
  Qvol=FT*par.Rg*T/P;  u=Qvol/par.At;
  MWmix=(FMeOH*par.MW_MeOH+FO2*par.MW_O2+FHCHO*par.MW_HCHO+ ...
      FH2O*par.MW_H2O+FCO*par.MW_CO+FN2*par.MW_N2)/FT;
  rho_g=P*MWmix/(par.Rg*T);
  dPdz=-(150*(1-par.eps)^2/par.eps^3*par.mu_g*u/par.dp^2 + ...
       1.75*(1-par.eps)/par.eps^3*rho_g*u^2/par.dp);
  dP_dW=dPdz/(par.rho_b*par.At);

  dydW=[dFMeOH;dFO2;dFHCHO;dFH2O;dFCO;dFN2;dP_dW;dT_dW;dTc_dW];
end
function [value,isterminal,direction] = stopEvents(~,y)
  value    =[y(7)-0.2e5;  y(8)-(520+273.15)];
  isterminal=[1; 1];
  direction =[-1; 1];
end
end all
```

11.2 Disseny Intercanviadors de calor

L'apartat següent presenta, pas a pas, el disseny dels intercanviadors de calor del procés, prenent com a exemple l'equip E-303. La resta d'intercanviadors que operen amb el mateix sistema, és a dir, intercanviadors de carcassa i tubs (E-202 i E-302), s'han dimensionat seguint aquest mateix procediment.

11.2.1. Objectiu i abast

L'objectiu d'aquest apartat és documentar, amb el mateix ordre lògic del mètode de Kern, el disseny de l'intercanviador de calor per refredar un corrent líquid de mescla formaldehid-aigua des de 121,7 ºC fins a 25 ºC emprant aigua de servei a 20 ºC.

L'equip tractat és un intercanviador de carcassa i tubs sense canvi de fase en cap dels dos costats. Per tant, tot el càlcul es basa en calor sensible, estimació de coeficients individuals, coeficient global i comprovació final de pèrdues de càrrega. [33]

11.2.2. Base de disseny

11.2.2.1 Dades de procés realment disponibles

Taula 11.22. Dades disponibles del procés

Magnitud	Símbol	Valor	Observació
Fluid calent	-	Mescla formaldehid-aigua	Corrent de procés a refredar
Cabal màssic del fluid calent	m_h	11250 kg/h = 3,125 kg/s	Dada de partida
Temperatura d'entrada del fluid calent	T_h,in	121,7 ºC	Dada de partida
Temperatura de sortida del fluid calent	T_h,out	25,0 ºC	Dada de partida
Pressió d'entrada del fluid calent	P_h,in	175 kPa abs	Dada de partida
Fluid fred	-	Aigua de servei	Utilitat de refrigeració
Temperatura d'entrada de l'aigua	T_c,in	20,0 ºC	Dada de partida

Magnitud	Símbol	Valor	Observació
Pressió d'entrada de l'aigua	P_c,in	3,0 bar abs	Dada de partida
Restricció geomètrica	L/Ds	Entre 4 i 6	Condició imposada pel problema

11.2.2.2. Propietats de la mescla obtingudes a ASPEN HYSYS

Taula 11.23. Propietats físiques de la mescla

Magnitud	Símbol	Valor	Observació
Densitat a 121.7 ºC	rho_h,in	765.8 kg/m3	Dada de partida
Densitat a 25 ºC	rho_h,out	870.0 kg/m3	Dada de partida
Calor específic a 121.7 ºC	Cp_h,in	5,088 kJ/kg K	Dada de partida
Calor específic a 25 ºC	Cp_h,out	3,63 kJ/kg K	Dada de partida
Viscositat a 121.7 ºC	mu_h,in	0,11 mPa s	Dada de partida
Viscositat a 25 ºC	mu_h,out	0,4373 mPa s	Dada de partida
Conductivitat tèrmica a 121.7 ºC	k_h,in	0,4121 W/m K	Dada de partida
Conductivitat tèrmica a 25 ºC	k_h,out	0,4389 W/m K	Dada de partida
Fracció molar de formaldehid	x_HCHO	0,3006	Dada de partida
Fracció molar d'aigua	x_H2O	0,6994	Dada de partida

11.2.3. Hipòtesis de càlcul

11.2.3.1. Hipòtesis necessàries per completar el predimensionament

Taula 11.24. Perfil de cabals molars als reactors

Magnitud	Símbol	Valor	Observació
Fluid per carcassa	-	Mescla formaldehid-aigua	Es deixa l'aigua als tubs per conveniència de servei i neteja
Fluid per tubs	-	Aigua de servei	Hipòtesi de disseny
Tipus de circulació	-	Contracorrent	Base habitual del mètode de Kern
Passos inicials	ns = nt	1 i 1	Primera iteració del mètode
Temperatura final de l'aigua en el cas adoptat	T_c,out	35 ºC	Resultat de la iteració hidràulica
Cp mitjà de la mescla	Cp_h,med	4,359 kJ/kg K	Mitjana simple entre entrada i sortida
Propietats mitjanes mescla	-	rho = 817,9 kg/m3, mu = 0,2737 mPa s, k = 0,4255 W/m K	Usades a carcassa
Coeficient global inicial	U0	750 W/m2 K	Valor de partida per a l'àrea
Resistència d'embrutiment costat tubs	Rf,t	0,00035 m2 K/W	Valor típic adoptat
Resistència d'embrutiment costat carcassa	Rf,s	0.00020 m2 K/W	Valor típic adoptat
Material assumit per a la paret del tub	-	AISI 316L	Hipòtesi per al tancament preliminar

11.2.4. Desenvolupament seqüencial del mètode de Kern

11.2.4.1. Balanç tèrmic

El primer pas consisteix a calcular la càrrega tèrmica que s'ha d'extreure del corrent de procés i, amb ella, determinar el cabal d'aigua necessari per al cas final seleccionat.

$$Q = m_h \cdot Cp_h, med \cdot (T_h, in - T_h, out)$$

$$Q = 3{,}125 \cdot 4359 \cdot (121{,}7 - 25.0) = 1{,}317 \times 10^6\, W = 1317\, kW$$

Un cop coneguda la càrrega tèrmica, es calcula el cabal d'aigua. En la iteració final s'adopta una sortida de l'aigua a 35 ºC perquè permet reduir la pèrdua de càrrega als tubs respecte de l'alternativa de 30 ºC.

$$Q = m_c \cdot Cp_c \cdot (T_c, out - T_c, in)$$

$$m_c = 1{,}317 \times 10^6 / [4180 \cdot (35 - 20)] = 21{,}01\, kg/s = 75631\, kg/h$$

11.2.4.2. Càlcul de la DTML

Amb l'aigua als tubs i la mescla a carcassa, s'adopta circulació a contracorrent. Després es calculen els dos salts tèrmics extrems. [32]

$$\Delta T1 = T_h, in - T_c, out = 121{,}7 - 35{,}0 = 86{,}7\, ºC$$

$$\Delta T2 = T_h, out - T_c, in = 25{,}0 - 20{,}0 = 5{,}0\, ºC$$

$$DTML = (\Delta T1 - \Delta T2) / ln(\Delta T1 / \Delta T2)$$

$$DTML = (86{,}7 - 5{,}0) / \ln(86{,}7 / 5) = 28{,}64\, ºC$$

11.2.4.3. Correcció de la DTML

Segons Kern, en la primera iteració es parteix d'1 pas per carcassa i 1 per tubs. Tot i això, la solució final adoptada treballa amb 2 passos per carcassa i 4 per tubs. Per a aquesta configuració el factor F es manté alt i es considera aproximadament igual a 1 en aquest predimensionament. [32]

$$(DTML)c = DTML \cdot F$$

$$(DTML)c \approx 28{,}64 \cdot 1{,}00 = 28{,}64\, ºC$$

11.2.4.4. Selecció inicial de l'àrea i de la geometria dels tubs

Amb un coeficient global inicial U0 s'obté l'àrea necessària. Després s'escullen un diàmetre exterior de tub comercial, una longitud raonable i una disposició de tubs compatible amb la neteja i la transferència. [32]

$$A = Q / [U0 \cdot (DTML)c]$$

$$A = 1{,}317 \times 10^6 / (750 \cdot 28{,}64) = 61{,}33\ m2$$

Se seleccionen tubs de 19,05 mm de diàmetre exterior i 3,05 m de longitud. La disposició adoptada és triangular, amb pitch igual a 1,25 vegades el diàmetre exterior del tub.

$$p_t = 1{,}25 \cdot D_e = 1{,}25 \cdot 19{,}05 = 23{,}81\ mm$$

$$A_tub = \pi \cdot D_e \cdot L = \pi \cdot 0{,}01905 \cdot 3{,}05 = 0{,}1825\ m2/tub$$

$$N_t, calc = A / A_tub = 61{,}33 / 0{,}1825 = 336\ tubs$$

$$N_t, adoptat = 338\ tubs$$

11.2.4.5. Diàmetre del feix, diàmetre de carcassa i relació L/Ds

A partir del nombre de tubs, del nombre de passos per tubs i del pitch escollit s'estima el diàmetre del feix. Amb aquest valor es proposa una carcassa comercial i es comprova la relació geomètrica imposada al problema. [32]

$$D_b = D_e \cdot (N_t / K1)\text{^}(1/n1)$$

$$Per\ a\ 4\ passos\ i\ pitch\ triangular: K1 = 0{,}175\ ;\ n1 = 2{,}285$$

$$D_b = 19{,}05 \cdot (338 / 0{,}175)\text{^}(1/2{,}285) = 522{,}3\ mm$$

$$D_s, calc \approx 578\ mm\ ;\ D_s, adoptat = 600\ mm$$

$$L / D_s = 3050 / 600 = 5{,}08$$

La restricció 4 < L/Ds < 6 queda satisfeta, de manera que la combinació L = 3,05 m i Ds = 600 mm és vàlida. [32]

11.2.4.6. Selecció del nombre de passos per tubs a partir de la velocitat

Kern recomana contrastar la velocitat obtinguda amb valors típics. El costat tubs condueix aigua de servei, de manera que interessa mantenir-se en una zona prou alta per transferir calor però sense disparar la pèrdua de càrrega. [32]

$$N_tp = N_t / n_pt = 338 / 4 = 84{,}5\ tubs\ per\ pas$$

$$A_pàs,t = N_tp \cdot (\pi \cdot D_i^2 / 4) = 0{,}01646\ m2$$

$$v_t = m_c / (\rho_c \cdot A_pàs,t) = 21{,}01 / (995 \cdot 0{,}01646) = 1{,}283\ m/s$$

La velocitat queda lleugerament per sota de l'interval ideal d'aigua als tubs de 1,5 a 2,5 m/s, però continua sent acceptable i, sobretot, permet mantenir la pèrdua de càrrega en un nivell raonable. En la iteració prèvia amb aigua a 30 ºC de sortida, la velocitat era més gran, però la pèrdua de càrrega als tubs resultava excessiva.

11.2.4.7. Deflectors i àrea de pas a carcassa

Un cop fixada la carcassa, se seleccionen el tall de deflector i la separació entre deflectors. L'objectiu és aconseguir una velocitat de carcassa típica sense penalitzar massa la pèrdua de càrrega. [32]

$$Nombre\ de\ deflectors\ adoptat = 14$$

$$l_B = L / (N_b + 1) = 3{,}05 / 15 = 0{,}203\ m$$

$$l_B / D_s = 0{,}203 / 0{,}600 = 0{,}339$$

$$A_ST = l_B \cdot D_s \cdot (p_t - D_e) / (p_t \cdot n_ps)$$

$$A_ST = 0{,}203 \cdot 0{,}600 \cdot (0{,}02381 - 0{,}01905) / (0{,}02381 \cdot 2) = 0{,}0122\ m2$$

$$v_s = m_h / (\rho_h \cdot A_ST) = 3{,}125 / (817{,}9 \cdot 0{,}0122) = 0{,}313\ m/s$$

La velocitat del costat carcassa sí que queda just dins de l'interval típic recomanat per Kern per a líquids a carcassa, aproximadament de 0,3 a 1 m/s. [32]

11.2.4.8. Coeficient individual costat tubs

Amb la velocitat i les propietats mitjanes de l'aigua es calculen els grups adimensionals del costat tubs i s'estima el coeficient convectiu corresponent.

$$Re_t \approx 2{,}51 \times 10^4$$

$$Pr_t \approx 5{,}39$$

$$h_t \approx 6138\ W/m2\ K$$

El flux dins dels tubs és turbulent. Això afavoreix la transmissió de calor i fa raonable l'ús d'una correlació del tipus Kern o Dittus-Boelter en aquest predimensionament.

11.2.4.9. Coeficient individual costat carcassa

A carcassa es calcula primer el diàmetre equivalent i després s'estimen Reynolds, Prandtl i el coeficient convectiu a partir del factor jh del mètode de Kern.

$$D_eq = 1.10 \cdot (p_t^2 - 0{,}917 \cdot D_e^2) \,/\, D_e = 13{,}53\ mm$$

$$Re_s \approx 1{,}27 \times 10^4$$

$$Pr_s \approx 2{,}80$$

$$h_s \approx 2853\ W/m2\ K$$

11.2.4.10. Coeficient global real

L'àrea real canvia lleugerament respecte de l'àrea teòrica per l'arrodoniment del nombre de tubs. Per això, abans de tancar el disseny, es recalcula el coeficient global requerit i es compara amb el coeficient global real. [32]

$$A_real = N_t \cdot \pi \cdot D_e \cdot L = 338 \cdot \pi \cdot 0{,}01905 \cdot 3{,}05 = 61{,}70\ m2$$

$$U_req = Q \,/\, [A_real \cdot (DTML)c] = 1{,}317 \times 10^6 \,/\, (61{,}70 \cdot 28{,}64) = 745{,}6\ W/m2\ K$$

$$U_R \approx 778{,}7\ W/m2\ K$$

Com que U_R és més gran que U_req, l'equip no queda infradimensionat. El marge tèrmic és d'aproximadament el 4,4%, valor que es pot considerar moderat i raonable.

11.2.4.11. Pèrdues de càrrega

L'última comprovació de Kern consisteix a verificar que les pèrdues de càrrega a tubs i a carcassa no siguin excessives. Aquesta etapa és la que obliga a descartar l'alternativa amb aigua de sortida a 30 ºC. [32]

$$\Delta P_t \approx 24{,}1\ kPa$$

$$\Delta P_s \approx 18{,}5\ kPa$$

En el cas finalment adoptat, ambdues pèrdues de càrrega són raonables per a un càlcul preliminar. En canvi, quan es va provar una aigua de sortida a 30 ºC, la velocitat als tubs va augmentar i la pèrdua de càrrega del costat tubs es va situar entorn de 63 kPa, valor menys defensable per al disseny seleccionat.

11.2.5. Resum de les iteracions i decisió final

11.2.5.1. Iteracions rellevants del disseny

Taula 11.25. Iteracions rellevants realitzades durant el disseny

Magnitud	Símbol	Valor	Observació
Cas assajat	-	Aigua 20 → 30 ºC	Millorava la velocitat als tubs
Resultat del cas assajat	ΔP_t	≈ 63 kPa	Es descarta per pèrdua de càrrega elevada
Cas final	-	Aigua 20 → 35 ºC	Redueix cabal i pèrdua de càrrega
Passos finals	ns / nt	2 / 4	Compromís adequat entre tèrmica i hidràulica
Longitud final	L	3,05 m	Compatible amb L/Ds
Carcassa final	Ds	600 mm	Diàmetre adoptat i estandarditzat
Nombre final de tubs	Nt	338	Àrea real suficient

11.3. Disseny evaporadors

L'apartat següent presenta, pas a pas, el disseny dels evaporadors de calor del procés, prenent com a exemple l'equip E-201. L'altre evaporador que opera amb el mateix sistema, és a dir, l'equip RB-301, s'ha dimensionat seguint aquest mateix procediment.

11.3.1. Objectiu i abast

L'objectiu d'aquest equip és vaporitzar completament un corrent de metanol que entra líquida a 25,04ºC i 180 kPa abs fins a obtenir vapor saturat. El desenvolupament

principal s'organitza amb el mateix ordre lògic que el mètode de Kern per a intercanviadors de carcassa i tubs [32]. Tanmateix, com que el servei real inclou canvi de fase a la carcassa, el càlcul del coeficient d'ebullició, del flux crític i del dimensionament específic del kettle es recolza en la referència secundària de Towler i Sinnott [33].

Cada etapa es presenta primer l'equació general, després la substitució numèrica i finalment el resultat, amb un nivell de detall suficient perquè un estudiant que comença enginyeria química pugui seguir el fil sense perdre's.

11.3.2. Dades de partida i propietats adoptades

Taula 11.26. Dades i propietats dels corrents

Fluid	Magnitud	Símbol	Valor	Unitats	Observació
Metanol	Cabal màssic	m_MeOH	5319,31	Kg/h	Dada de partida
Metanol	Temperatura d'entrada	T_in	25,04	ºC	Dada de partida
Metanol	Pressió d'operació	P	1,80	Bar	Dada de Partida
Metanol	Densitat d'entrada	rho	786	Kg/m3	Dada de partida
Metanol	Calor específic líquid	Cp	3,604	kJ/(kg·K)	Dada de partida
Metanol	Viscositat d'entrada	mu	0,544	mPa·s	Dada de partida
Metanol	Conductivitat d'entrada	k	0,1797	W/(m·K)	Dada de partida
Therminol 66	Temperatura d'entrada	T_h,in	265	ºC	Condició de servei
Therminol 66	Pressió d'operació	P_h	3	bar	Condició de servei
Therminol 66	Temperatura de sortida adoptada	T_h,out	230	ºC	Hipòtesi per tancar el balanç
Therminol 66	Cp mitjà adoptat	Cp_h	2,36	kJ/(kg·K)	Mitjana razonable
Therminol 66	Propietats hidràuliques de càlcul	-	Rho=848 mu=0,567 k=0,1004	SI	Preses a 250ºC, prop de T Mitjana []

11.3.3. Hipòtesis de disseny

L'estat final del metanol es pren com a vapor saturat a 180 kPa abs. No es considera sobreescalfament.

Es fa circular el Therminol 66 pels tubs i el metanol per la carcassa. Aquesta distribució és convenient perquè deixa el costat bifàsic a la carcassa tipus kettle i manté un fluid monofàsic net als tubs.

El material comú de l'equip es fixa com a acer al carboni, coherent amb el nivell de predimensionament i amb les decisions prèvies del projecte.

Els factors d'embrutiment es prenen com 1/hR,s = 1/10000 m2·K/W per al metanol i 1/hR,t = 1/5000 m^2·K/W per al Therminol. Són valors prudents de predimensionament [33].

11.3.4. Desenvolupament del càlcul

11.3.4.1. Balanç Tèrmic

El punt de partida és decidir quin fluid circula per la carcassa i quin pels tubs, i després resoldre el balanç tèrmic . En aquest cas el metanol va per carcassa i el Therminol 66 pels tubs.

- **Càlcul de la temperatura de saturació del metanol a 1,8 bar abs**

$$log\ 10\ (P_{bar}) = \frac{A - B}{(T_K + C)}$$

$$T_{SAT} = \frac{B}{(A - log10(P))} - C = \frac{1581{,}341}{(5{,}20409 - log10(1{,}8)} - (-33{,}5) = \ 353{,}04\ ºK$$

La temperatura de saturació s'obté amb la correlació tipus Antoine publicada per NIST per al metanol [33].

- **Calor sensible per portar el metanol desde 25,04ºC fins al seu punt d'ebullició**

$$Q_{sens} = m \cdot Cp \cdot (T_{sat} - T_{in})$$

$$Q_{sens} = 1{,}477586 \cdot 3{,}604 \cdot (79{,}89 - 25{,}04) = 292{,}08\ kW$$

Aquest terme representa només l'energia necessària per escalfar el metanol líquid fins a la seva temperatura d'ebullició. Encara no hi ha canvi de fase; simplement el líquid s'escalfa.

- **Calor latent de vaporització**

$$Q_{lat} = m \cdot \lambda$$

$$Q_{lat} = 1{,}477586 \cdot 1066{,}96 = 1576{,}52\ kW$$

Aquest segon terme sol ser el més important en evaporadors. Aquí és on s'aporta l'energia necessària per transformar el metanol líquid en vapor a temperatura pràcticament constant.

- **Deure tèrmic total de l'evaporador**

$$Q = Q_{sens} + Q_{lat}$$

$$Q = 292{,}08 + 1{,}576{,}52 = 1868{,}61\ kW$$

La suma de totes dues contribucions és el deure tèrmic que realment haurà de subministrar l'intercanviador. Aquest valor és la base de pràcticament tot el dimensionament posterior.

- **Cabal màssic de Therminol necessari**

$$m_h = \frac{Q}{(Cp_h \cdot (T_h, in - T_h, out\ ))}$$

$$m_h = \frac{1868{,}61}{(2.36 \cdot (265 - 230\ ))} = 22{,}62\,\frac{kg}{s} = 81440\,\frac{kg}{h}$$

Aquest càlcul respon a una idea molt simple: si es fixa quin refredament es permet a l'oli tèrmic, automàticament queda fixat el cabal calent necessari per transportar l'energia requerida.

11.3.4.2. Càlcul DTML

En un kettle reboiler el metanol bull pràcticament a temperatura constant. Per tant, només el costat de tubs experimenta lliscament tèrmic.

- **Diferències terminals de temperatura**

$$DTML = \frac{\Delta T1 - \Delta T2}{ln(\frac{\Delta T1}{\Delta T2})}$$

$$DTML = \frac{185{,}11 - 150{,}11}{ln(\frac{185{,}11}{150{,}11})} = 167\ ºC$$

La DTML es pot entendre com una diferència de temperatura 'efectiva'. No és una simple mitjana aritmètica, perquè la força impulsora no es manté constant al llarg de l'equip.

11.3.4.3. Correcció de la DTML

La DTML es corregeix amb un factor F quan hi ha diversos passos i configuracions allunyades del contracorrent ideal [32]. En aquest cas es treballa amb un volum d'ebullició tipus kettle i un feix en U, de manera que la correcció clàssica es pren com a unitària en el predimensionament.

$$(DTML)_c = F \cdot DTML$$
$$(DTML)_c = 1 \cdot 167 = 167\ ºC$$

En intercanviadors més complexos, aquest factor pot reduir de manera apreciable la força impulsora. En aquest cas, la simplificació F = 1 és raonable.[33]

11.3.4.4. Selecció de l'intercanviador

Es comença amb un valor temptatiu del coeficient global U i, amb aquest valor, s'estima l'àrea necessària. Aquí es pren U0 = 500 W/(m²·K), un valor raonable per a un servei oli tèrmic / ebullició orgànica en predimensionament [33].

$$A0 = \frac{Q}{U0 \cdot (DTML)_c}$$

$$A0 = \frac{1868607}{500 \cdot 167} = 22.38\ m^2$$

Aquest resultat és una primera aproximació. Encara no és l'àrea final de l'equip, sinó el punt de partida per començar a triar tubs, longitud i geometria real.

Taula 11.27. Dades geomètriques del disseny del intercanviador de calor

Magnitud	Símbol	Valor	Valor	Observació
Diametre exterior del tub	D_o	19	mm	Selecció base
Diàmetre interior del tub	D_i	16	Mm	Selecció base
Longitud nominal per U-tube	L	4,88	M	Valor comercial habitual
Pas de tubs	P_t	28,5	Mm	1,5·d_o per a kettle
Disposició	-	quadrada	-	Afavoreix la separación de vapor

- **Àrea externa per U-tube**

$$A_{tub} = \pi \cdot d_o \cdot L$$

$$A_{tub} = \pi \cdot 0{,}019 \cdot 4{,}88 = 0{,}2913\ m^2$$

- **Nombre teòric de U-tubes**

$$N_{req} = \frac{A0}{A_tub}$$

$$N_{req} = \frac{22{,}38}{0{,}2913} = 76{,}83\ tubs$$

El valor surt no enter perquè és un resultat purament matemàtic. En el disseny real sempre cal transformar aquest nombre en una configuració construïble i comercialment plausible. Com que el nombre de tubs ha de ser enter i convé conservar un cert marge, s'adopten 80 U-tubes. Això equival a 160 extrems de tub a la placa tubular.

- **Àrea real instal·lada**

$$A = N_u \cdot A_tub$$

$$A = 80 \cdot 0{,}2913 = 23{,}3\ m^2$$

Per estimar el diàmetre del feix es parteix de la correlació geomètrica de Kern per a pas quadrat i 2 passos, que està tabulada per a p_t = 1,25*d_o [32]. Després es corregeix proporcionalment al pas real d'1,5*d_o.

$$D_b, 1{,}25 = d_o(mm) \cdot \left(\frac{N_t}{K1}\right)^{\frac{1}{n1}}$$

$$D_b, 1{,}25 = 19 \cdot \left(\frac{160}{0{,}215}\right)^{\frac{1}{2{,}207}} = 380{,}1\ mm$$

$$D_b, 1{,}5 = D_b, 1{,}25 \cdot (\frac{1{,}5}{1{,}25})$$

$$D_b, 1{,}5 = 380{,}1\ \cdot \left(\frac{1{,}5}{1{,}25}\right) = 456{,}1\ mm$$

Aquest ajust no pretén ser una veritat exacta de detall, sinó una manera coherent de traslladar la correlació geomètrica clàssica de Kern a una disposició més pròpia d'un kettle reboiler. Towler i Sinnott recomanen per a kettle un quocient diàmetre de carcassa / diàmetre de feix entre 1,7 i 2,0 quan el flux tèrmic supera 40 kW/m2 [33]. Es selecciona D_s = 0,90 m, amb la qual cosa D_s/D_b = 1,97, dins del rang recomanat.

$$\begin{matrix} D_s/D_b \\ \frac{0{,}9}{0{,}456} = 1{,}97 \end{matrix}$$

En un carcassa i tubs clàssic, Kern demana també comprovar L/D_s entre 4 i 6. Si es pren la longitud total de l'U-tube, 4,88/0,90 = 5,42, el valor cau dins del rang. Si es pren només la pota recta, 2,44/0,90 = 2,71. En un kettle aquesta comprovació deixa de ser el criteri rector, perquè passen a governar el flux crític, el desenganxament de vapor i el freeboard [33].

11.3.4.5. Correcció U amb l'àrea real

$$U_{req} = \frac{Q}{(A \cdot (DMTL)_c)}$$

$$U_{req} = \frac{1868607}{(23{,}3 \cdot 167)} = 480{,}16 \frac{W}{m^2 \cdot K}$$

Aquest valor és molt útil perquè actua com a objectiu. Si després, quan es calculin els coeficients individuals, el coeficient global real surt per sota d'aquest valor, l'equip quedaria curt.

11.3.4.6. Coeficients individuals

Costat de tubs. Es fan servir propietats del Therminol 66 a 250 °C perquè la temperatura mitjana de l'oli és de 247.5 °C i el butlletí tècnic oficial dona dades tabulades a aquesta temperatura.

- **Àrea de pas total als tubs**

$$A_{pas},t = N_u \cdot \pi \cdot \frac{d_i^2}{4}$$

$$A_{pas},t = 80 \cdot \pi \cdot \frac{d0{,}016^2}{4} = 0{,}01608\ m^2$$

- **Velocitat i densitat de flux màssic als tubs**

$$v_t = \frac{m_h}{rho \cdot A_{pas},t}$$

$$G_t = \frac{m_h}{A_{pas},t}$$

$$v_t = \frac{22{,}6225}{848 \cdot 0{,}1608} = 1{,}66\ m/s$$

$$G_t = \frac{22{,}6225}{0{,}01608} = 1406{,}4\ \frac{kg}{m^2 \cdot s}$$

La velocitat als tubs és una variable molt important. Si és massa baixa, la transferència de calor empitjora i pot afavorir l'embrutiment; si és massa alta, la pèrdua de càrrega creix ràpidament.

- **Nombres adimensionals als tubs**

$$Re_t = d_i \cdot \frac{G_t}{mu}$$

$$Pr_t = Cp \cdot \frac{mu}{k}$$

$$Re_t = 0{,}016 \cdot \frac{1406{,}4}{0{,}000587} = 39688$$

$$Pr_t = 2{,}38 \cdot 1000 \cdot \frac{0{,}000567}{0{,}1004} = 13{,}44$$

El Reynolds indica el règim de circulació del fluid i el Prandtl relaciona la difusió de quantitat de moviment amb la difusió tèrmica. Són els dos nombres clau per estimar la convecció interna.

- **Factor j_h i coeficient de pel·lícula als tubs sense corregir**

$$j_h = 0{,}027 \cdot Re_t^{-0{,}2}$$

$$h_{t0} = \left(j_h \cdot Re_t \cdot \mathrm{Pr}_t^{0{,}33}\right) \cdot \frac{k}{d_i}$$

$$j_h = 0{,}027 \cdot 39688^{-0{,}2} = 0{,}003248$$

$$h_{t0} = 1906{,}7 \frac{W}{m^2 \cdot K}$$

- **Estimació de la temperatura de paret per aplicar la correcció de viscositat**

$$h_{t0} \cdot (t_w - t) = U_{req} \cdot (T - t)$$

$$1906{,}7 \cdot (t_w - 247{,}5) = 480{,}2 \cdot (79{,}89 - 247{,}5) => t_w = 205{,}3ºC$$

- **Coeficient de pel·lícula als tubs corregit per viscositat**

$$h_t = h_{t0} \cdot \left(\frac{mu}{mu_w}\right)^{0{,}14}$$

$$h_t = 1906{,}7 \cdot \left(\frac{0{,}000567}{0{,}00082}\right)^{0{,}14} = 1810{,}8 \frac{W}{m^2 \cdot K}$$

La correcció per viscositat acostuma a ser moderada, però és útil perquè la viscositat prop de la paret no sempre coincideix amb la viscositat del fluid a la temperatura mitjana de circulació.

- **Flux tèrmic mitjà al feix**

$$q'' = \frac{Q}{A}$$

$$q'' = \frac{1868607}{23.3} = 80187.1\ W/m^2$$

- **Coeficient d'ebullició segons Mostinski**

$$h_{nb} = 0{,}104 * (P_c)^{0{,}69} \cdot (q'')^{0{,}7} \cdot \left(\left(\frac{P}{P_c}\right)^{0{,}17} + 4 \cdot \left(\frac{P}{P_c}\right)^{1{,}2} + 10 \cdot \left(\frac{P}{P_c}\right)^{10}\right)$$

$$h_{nb} = 0{,}104 \cdot (80{,}97)^{0{,}69} \cdot (80187{,}1)^{0{,}7} \cdot \left(\left(\frac{1{,}80}{80{,}97}\right)^{0{,}17} + 4 \cdot \left(\frac{1{,}80}{80{,}97}\right)^{1{,}2} + 10 \cdot \left(\frac{1{,}80}{80{,}97}\right)^{10}\right) = 3302{,}1 \frac{W}{m2 \cdot K}$$

Aquesta correlació resumeix el comportament d'ebullició nucleada del fluid. En altres paraules, estima com de bé transfereix calor el metanol mentre forma bombolles sobre la superfície tubular.

11.3.4.7. Coeficient global real

- **Coeficient global referit a l'àrea externa**

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_s} + \frac{1}{hR}, s + d_o \cdot \frac{ln\left(\frac{d_o}{d_i}\right)}{2 \cdot k_w} + \left(\frac{d_o}{d_i}\right) \cdot \left(\frac{1}{hR}, t\right) + \frac{d_o}{d_i \cdot h_t}$$

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{3302{,}1} + \frac{1}{10000} + 0{,}019 \cdot \frac{ln\left(\frac{0{,}019}{0{,}016}\right)}{2 \cdot 45} + \left(\frac{0{,}019}{0{,}016}\right) \cdot \left(\frac{1}{5000}\right) + \frac{0{,}019}{0{,}016 \cdot 1805{,}5} = 750{,}5 \frac{W}{m^2 \cdot K}$$

El coeficient global no és més que la combinació de totes les resistències tèrmiques en sèrie: convecció a carcassa, embrutiment, paret metàl·lica, embrutiment a tubs i convecció a tubs. El valor calculat del coeficient global real supera amb comoditat el valor requerit per l'àrea adoptada. Per tant, l'equip no queda infradimensionat tèrmicament.

11.3.4.8, Pèrdues de càrrega

- **Factor de fricció adoptat per als tubs**

$$j_f = 0{,}0014 + \frac{0{,}125}{Re_t^{0{,}32}}$$

$$j_f = 0{,}0014 + \frac{0{,}125}{39688^{0{,}32}} = 0{,}00562$$

- **Pèrdua de pressió al costat de tubs**

$$\Delta P_t = N_p \cdot \left[8 \cdot j_f \cdot \left(\frac{L}{d_i}\right) \cdot \left(\frac{mu}{mu_w}\right)^{-0{,}14} + 2{,}5\right] \cdot rho \cdot \frac{v_t^2}{2}$$

$$DeltaP_t = 2 \cdot \left[8 \cdot 0{,}005620 \cdot \left(\frac{4{,}88}{0{,}016}\right) \cdot \left(\frac{0{,}000567}{0{,}00082}\right)^{-0.14} + 2{,}5\right] \cdot 848 \cdot 1.\frac{659^2}{2} = 39514\ Pa$$

Aquesta pèrdua de càrrega recull tant l'efecte del fregament al llarg dels tubs com les pèrdues locals associades als canvis de direcció i entrada/sortida del fluid. La pèrdua de càrrega del costat de carcassa no s'avalua amb l'expressió monofàsica de Kern, perquè la carcassa actua com a volum d'ebullició i separació. En aquest cas és més important comprovar el flux crític i la velocitat superficial de vapor [33].

11.3.5. Comprovacions específiques de kettle reboiler

Aquestes comprovacions no substitueixen el mètode principal, sinó que completen la part que el document base no resol perquè es tracta d'un servei amb canvi de fase.

- **Flux crític admissible del feix**

$$q''_{cb} = K_b \cdot \left(\frac{p_t}{d_o}\right) \cdot \lambda \cdot \frac{[\sigma \cdot g \cdot (rho_L - rho_v) \cdot rho_v^2]^{0{,}25}}{sqrt(N_t)}$$

$$q''_{cb} = 0{,}44 \cdot \left(\frac{0{,}0285}{0{,}019}\right) \cdot 1066958 \cdot \frac{[0{,}016 \cdot 9{,}81 \cdot (740 - 1{,}97) \cdot 1{,}97^2]^{0{,}25}}{sqrt(160)} = 256348 \frac{W}{m2}$$

Aquesta és una de les comprovacions més importants en un kettle. Si el flux tèrmic real s'acostés massa al flux crític, l'ebullició podria deixar de ser estable i el comportament de l'equip seria poc segur. Com que el flux tèrmic real és 80.19 kW/m2 i el màxim admissible amb factor de seguretat és 179.44 kW/m2, l'evaporador treballa amb un marge còmode respecte del flux crític.

- **Comprovació preeliminar de velocitat superficial de vapor**

$$u_v < 0{,}2 \cdot sqrt\left(\frac{rho_L - rho_v}{rho_v}\right)$$

$$u_v = \frac{1{,}4776}{1{,}97 \cdot 2{,}070} = 0{,}362\,\frac{m}{s}$$

$$u_v, max = 0{,}2 \cdot sqrt\left(\frac{740 - 1{,}97}{1{,}97}\right) = 3{,}871\,\frac{m}{s}$$

La idea d'aquesta comprovació és evitar arrossegament excessiu de gotes líquides cap a la sortida de vapor. Si la velocitat superficial és massa alta, la separació vapor-líquid empitjora. Aquesta comprovació s'ha fet prenent un nivell de líquid preliminar de 0.60 m des del fons, que deixa un freeboard de 0.30 m. El valor és superior al mínim de 0.25 m recomanat per a kettle [33].

L'evaporador resultant és tèrmicament viable. L'àrea real instal·lada de 23.30 m2 permet cobrir un deure de 1868.61 kW amb una DTML corregida de 167.00 °C, i el coeficient global real estimat, 750.5 W/(m2·K), supera el valor requerit de 480.2 W/(m2·K). A més, el flux tèrmic mitjà de 80.19 kW/m2 queda molt per sota del flux crític admissible de 179.44 kW/m2, cosa que reforça la coherència del disseny adoptat.

11.4. Disseny condensadors

L'apartat següent presenta, pas a pas, el disseny dels intercanviadors de calor del procés, prenent com a exemple l'equip CN-301. La resta d'intercanviadors que operen amb el mateix sistema, és a dir, intercanviadors de carcassa i tubs amb evaporació (E-301), s'han dimensionat seguint aquest mateix procediment.

11.4.1. Objectiu i criteri general de disseny

L'objectiu de l'equip és retirar calor del corrent de cap d'una columna de destil·lació per condensar-ne una part. El condensat generat proporciona el reflux de la columna i el producte de cap, mentre que la fracció no condensada surt com a vapor residual. Per aquest motiu l'equip es tracta com un condensador parcial.

El tipus d'equip seleccionat és un intercanviador de carcassa i tubs. Aquesta elecció és adequada perquè el servei requereix una superfície d'intercanvi moderada-alta, treballa amb pressió de procés definida, admet neteja i manteniment, i permet situar l'aigua de refrigeració dins dels tubs per controlar millor la velocitat i l'embrutiment. [33].

11.4.2. Dades de partida

11.4.2.1. Dades de procés

Taula 11.28. Dades del procés per al disseny del evaporador

Magnitud	Valor	Comentari
Tipus de condensador	Parcial	Condensa només una fracció del corrent de cap.
Cabal molar d'entrada al condensador	549,43 kmol/h	Corrent de cap que arriba al condensador.
Producte de cap	1490 kg/h	Cabal indicat per al destil·lat de cap.
Relació de reflux	R = L/D = 2	S'utilitza per estimar el condensat generat.
Pressió de procés	160 kPa = 1,60 bar	Pressió al costat carcassa.
Temperatura d'entrada procés	113,6 ºC	Molt propera a la temperatura de saturació de l'aigua a 160 kPa.
Deure tèrmic del condensador	9,620·10^6 kJ/h	Valor prioritari per al dimensionament tèrmic.

11.4.2.2. Composició màssica del corrent de procés

Taula 11.28. Composició màssica de la mescla al intercanviador de calor

Component	Fracció màssica
Metanol	0,0005
Formaldehid	0,0130
Oxigen	0,0001
Nitrogen	0,0004
Aigua	0,9859

11.4.2.3. Dades del refrigerant

Taula 11.29. Propietats de l'aigua de refrigeració

Magnitud	Valor adoptat
Fluid	Aigua de xarxa
Temperatura d'entrada	20 ºC
Temperatura de sortida	40 ºC
Pressió d'entrada	3 bar
Calor específic mitjà	4,18 kJ/(kg·K)
Densitat mitjana	995 kg/m^3

11.4.3. Propietats i hipòtesis adoptades

11.4.3.1. Propietats del procés

Taula 11.30. Propietats del procés

Propietat	Valor
Densitat del vapor d'entrada	0,9131 kg/m^3
Viscositat del vapor	0,009552 mPa·s
Conductivitat tèrmica del vapor	0,0253 W/(m·K)
Calor específic del vapor	1,912 kJ/(kg·K)
Calor latent efectiu	2152 kJ/kg

11.4.3.2. Hipòtesis principals

- El corrent de procés circula per la carcassa i l'aigua de refrigeració circula pels tubs.
- La condensació es considera aproximadament isotèrmica a 113 ºC, perquè la mescla és majoritàriament aigua i la pressió és 160 kPa.
- El sobreescalfament entre 113,6 ºC i 113 ºC és petit i es negligeix en el predimensionament.

- La fracció condensada s'estima a partir del producte de cap i la relació de reflux.
- Es treballa amb un sol pas per carcassa i es corregeix la DTML amb F = 1 en la primera iteració.
- El coeficient global inicial adoptat és U = 700 W/(m^2·K), valor prudent per a condensació amb aigua i presència de no condensables en baixa proporció.
- Els factors d'embrutiment s'adopten de criteri de disseny: 0,0002 m^2·K/W per aigua de xarxa i 0,0001 m^2·K/W per al costat procés.

11.4.4. Desenvolupament del càlcul segons la seqüència de Kern

11.4.4.1. Balanç tèrmic

El primer pas és quantificar la calor que ha de retirar el condensador. En aquest cas el deure tèrmic ve donat per la simulació o base de disseny.

$$Q = 9{,}620 \cdot 10\text{^}6\ kJ/h$$

$$Q = (9{,}620 \cdot 10\text{^}6\ kJ/h) / 3600 = 2672\ kW$$

Per comprovar que el valor és coherent amb el condensador parcial, es calcula el pes molecular mitjà de la mescla a partir de les fraccions màssiques.

$$PM_m = 1 / \Sigma(w_i / PM_i)$$

$$PM_m \approx 18{,}12\ kg/kmol$$

$$m_entrada = 549{,}43\ kmol/h \cdot 18{,}12\ kg/kmol = 9955\ kg/h$$

Amb una relació de reflux R = L/D = 2 i un producte de cap D = 1490 kg/h:

$$L = R \cdot D = 2 \cdot 1490 = 2980\ kg/h$$

$$L + D = 2980 + 1490 = 4470\ kg/h$$

El calor retirat per unitat de condensat és:

$$\lambda_efectiu = Q / (L + D) = 9{,}620 \cdot 10\text{^}6 / 4470 = 2152\ kJ/kg$$

Aquest valor és coherent amb la condensació d'una mescla majoritàriament aquosa a pressió moderada, ja que és proper a la calor latent de l'aigua a 160 kPa.

11.4.4.2. Assignació de fluids

Segons el criteri habitual de disseny, l'aigua de refrigeració es col·loca pels tubs. Això facilita la neteja, permet controlar la velocitat i redueix el risc d'embrutiment intern. El vapor de procés es col·loca a la carcassa, on pot condensar parcialment i separar-se com a mescla bifàsica.

Taula 11.31. Assignació de ubicació als fluids

Costat	Fluid	Motiu
Tubs	Aigua de xarxa	Fluid potencialment embrutidor, fàcil de netejar i amb velocitat ajustable amb passos.
Carcassa	Vapor de cap de columna	Servei de condensació parcial i sortida bifàsica.

11.4.4.3. Temperatura de condensació

La pressió de procés és 160 kPa. Com que la composició és 98,59% en massa d'aigua, es pren com a primera aproximació la temperatura de saturació de l'aigua a aquesta pressió.

$$T_cond \approx 113\ ºC$$

La temperatura d'entrada del procés és 113,6 ºC, de manera que la diferència amb la temperatura de condensació adoptada és petita. Per això el càlcul se centra en el deure latent i no en el refredament sensible del vapor.

11.4.4.4. Cabal d'aigua de refrigeració

S'adopta una sortida d'aigua de 40 ºC. Aquesta elecció evita un cabal d'aigua excessiu i conserva una diferència de temperatures elevada respecte al procés.

$$Q = m_aigua \cdot Cp_aigua \cdot (t_2 - t_1)$$

$$m_aigua = Q\ /\ [Cp_aigua \cdot (t_2 - t_1)]$$

$$m_aigua = 2672\ /\ [4{,}18 \cdot (40 - 20)] = 31{,}96\ kg/s$$

$$V_aigua = 31{,}96\ /\ 995 = 0{,}0321\ m^3/s = 115{,}7\ m^3/h$$

Per tant, el cabal adoptat per als tubs és 32,0 kg/s, equivalent aproximadament a 116 m^3/h.

11.4.4.5. Càlcul de la DTML

Com que la condensació es considera isotèrmica, la temperatura calenta és pràcticament constant. L'aigua entra a 20 ºC i surt a 40 ºC.

$$\Delta T_1 = T_cond - t_sortida = 113 - 40 = 73\,ºC$$

$$\Delta T_2 = T_cond - t_entrada = 113 - 20 = 93\,ºC$$

$$DTML = (\Delta T_2 - \Delta T_1) / ln(\Delta T_2 / \Delta T_1)$$

$$DTML = (93 - 73) / ln(93 / 73) = 82{,}6\,ºC$$

Per a la primera iteració es considera un pas per carcassa. Amb aquesta simplificació, el factor de correcció de la DTML és F = 1.

$$(DTML)_c = DTML \cdot F = 82{,}6 \cdot 1 = 82{,}6\,ºC$$

11.4.4.6. Estimació inicial del coeficient global i àrea requerida

El mètode de Kern proposa iniciar el disseny amb un coeficient global suposat a partir de bibliografia o experiència. Per a condensació amb aigua, però amb presència de no condensables en baixa proporció, s'adopta un valor prudent.

$$U_suposat = 700\,W/(m^2 \cdot K)$$

$$A_calc = Q / [U_suposat \cdot (DTML)_c]$$

$$A_calc = 2672000 / [700 \cdot 82{,}6] = 46{,}2\,m^2$$

Aquesta és l'àrea mínima de càlcul. No obstant això, no es recomana seleccionar exactament aquest valor perquè el condensador és parcial, hi ha no condensables i la geometria comercial obliga a arrodonir.

11.4.4.7. Selecció preliminar dels tubs

Es trien tubs comercials de 3/4 polzada, una mida molt habitual en intercanviadors de carcassa i tubs. La longitud adoptada és 10 ft.

Taula 11.32. Dades de construcció dels tubs

Paràmetre	Valor adoptat
Diàmetre exterior, OD	19,05 mm
Diàmetre interior aproximat, ID	16 mm
Longitud de tub	3050 mm
Material preliminar	AISI 316L per als tubs
Disposició	Triangular
Pitch	1,25·OD = 23,8 mm

11.4.4.8. Nombre de tubs i àrea instal·lada

El nombre de tubs es selecciona de manera que l'àrea instal·lada superi l'àrea mínima i permeti una velocitat d'aigua raonable.

$$N_t = 320\ tubs$$

$$A_instal \cdot lada = N_t \cdot \pi \cdot OD \cdot L$$

$$A_instal \cdot lada = 320 \cdot \pi \cdot 0{,}01905 \cdot 3{,}05 = 58{,}4\ m^2$$

El marge d'àrea respecte al mínim tèrmic és:

$$Marge = (58{,}4 - 46{,}2) / 46{,}2 = 26\ \%$$

Aquest marge és raonable per a predimensionament perquè compensa incerteses en el coeficient global, embrutiment i presència de gasos no condensables.

11.4.4.9. Diàmetre de carcassa i relació L/D

Amb 320 tubs, pitch triangular i 4 passos per tubs, s'estima un diàmetre de feix proper a 510 mm segons la correlació geomètrica indicada en el mètode de Kern.

$$D_b = OD \cdot (N_t / K_1)\text{^}(1/n_1)$$

$$Per\ pitch\ triangular\ i\ 4\ passos: K_1 = 0{,}175;\ n_1 = 2{,}285$$

$$D_b \approx 510\ mm$$

Afegint l'espai entre feix i carcassa, s'adopta un diàmetre interior de carcassa:

$$D_s = 560\ mm$$

La relació recomanada pel mètode de Kern és aproximadament entre 4 i 6.

$$L / D_s = 3{,}05 / 0{,}56 = 5{,}45$$

El valor 5,45 cau dins del rang recomanat, de manera que la geometria és acceptable com a predimensionament.

11.4.4.10. Selecció de passos per tubs i velocitat de l'aigua

El mètode de Kern recomana per aigua en tubs una velocitat típica entre 1,5 i 2,5 m/s. El nombre de passos per tubs s'utilitza per ajustar aquesta velocitat.

$$n_pt = 4\ passos\ per\ tubs$$

$$N_t\ per\ pas = N_t / n_pt = 320 / 4 = 80\ tubs/pas$$

$$A_p, 1\ tub = \pi \cdot ID^2/4 = \pi \cdot 0{,}016^2/4 = 2{,}01 \cdot 10\text{^} - 4\ m^2$$

$$A_p, total = 80 \cdot 2{,}01 \cdot 10\text{^} - 4 = 0{,}0161\ m^2$$

$$v_t = m_aigua / (\rho_aigua \cdot A_p, total)$$

$$v_t = 31{,}96 / (995 \cdot 0{,}0161) = 2{,}0\ m/s$$

La velocitat calculada és dins del rang recomanat, per tant, la selecció de 4 passos per tubs és adequada des del punt de vista de transferència de calor i control d'embrutiment.

11.4.4.11. Deflectors de carcassa

Els deflectors dirigeixen el flux del costat carcassa i milloren la transferència de calor. Seguint la guia de Kern, s'adopta un tall de deflector del 20-25% i una separació entre deflectors entre 0,3 i 0,5 vegades el diàmetre de carcassa.

$$l_B\ adoptat = 225\ mm$$

$$l_B / D_s = 0{,}225 / 0{,}56 = 0{,}40$$

$$N_baffles \approx (L / l_B) - 1 = (3{,}05 / 0{,}225) - 1 \approx 12{,}6$$

S'adopten 12 deflectors segmentals simples, amb tall del 20-25%. Aquesta elecció és coherent amb el rang recomanat i evita una separació massa petita que incrementaria la pèrdua de càrrega.

11.4.4.12. Coeficient global requerit amb l'àrea instal·lada

Després d'arrodonir el nombre de tubs i l'àrea instal·lada, es recalcula el coeficient global que realment hauria de proporcionar l'equip.

$$U_req \;=\; Q \;/\; [A_instal \cdot lada \;\cdot\; (DTML)_c]$$

$$U_req \;=\; 2.672.000 \;/\; [58{,}4 \;\cdot\; 82{,}6] \;=\; 554\; W/(m^2 \cdot K)$$

Aquest valor és inferior al coeficient global inicial suposat de 700 W/(m²·K). Això indica que l'equip té marge tèrmic. En un condensador parcial aquest marge és útil, perquè els no condensables poden reduir el coeficient efectiu de condensació.

11.4.4.13. Coeficient de pel·lícula del costat tubs

Per a l'aigua circulant pels tubs es pot utilitzar la correlació indicada en el mètode de Kern per a aigua.

$$h_t \;=\; 4200 \;\cdot\; (1{,}35 \;+\; 0{,}02 \cdot T) \;\cdot\; v_t\text{^}0{,}8 \;/\; ID\text{^}0{,}2$$

On T és la temperatura mitjana de l'aigua en ºC, v_t és la velocitat en m/s i ID és el diàmetre interior en mm.

$$T_mitjana, aigua \;=\; (20 \;+\; 40) \;/\; 2 \;=\; 30\; ºC$$

$$h_t \;=\; 4200 \;\cdot\; (1{,}35 \;+\; 0{,}02 \cdot 30) \cdot \frac{2{,}0^{0{,}8}}{16^{0{,}2}}$$

$$h_t \;\approx\; 8{,}2 \cdot 10^3\; W/(m^2 \cdot K)$$

El coeficient del costat tubs és alt, com és habitual amb aigua en règim turbulent. Per tant, la resistència dominant probablement no serà l'aigua, sinó el costat de condensació, l'embrutiment i la presència de no condensables.

11.4.4.14. Factors d'embrutiment i coeficient brut

Els factors d'embrutiment no es calculen des de primers principis; s'adopten a partir de criteris típics de servei. Això és habitual en el predimensionament amb Kern.

Taula 11.33. Factors d'embrutiment aigua de refrigeració

Costat	Factor d'embrutiment adoptat
Aigua de xarxa als tubs	$R_f,t = 0{,}0002\ m^2 \cdot K/W$
Procés a carcassa	$R_f,s = 0{,}0001\ m^2 \cdot K/W$
Total aproximat	$R_f,total = 0{,}0003\ m^2 \cdot K/W$

El coeficient global brut requerit per l'equip adoptat és el valor calculat amb l'àrea instal·lada:

$$U_brut,req \approx 554\ W/(m^2 \cdot K)$$

Si s'elimina aproximadament la resistència d'embrutiment total, es pot estimar un coeficient net equivalent:

$$1/U_brut = 1/U_net + R_f,total$$

$$1/U_net = 1/554 - 0{,}0003$$

$$U_net \approx 665\ W/(m^2 \cdot K)$$

Aquests valors són coherents amb el rang esperable per a un condensador amb aigua i marge de disseny.

11.4.4.15. Pèrdues de càrrega

Per al costat tubs, la velocitat de 2,0 m/s és tècnicament adequada. No obstant això, la pèrdua de càrrega ha de confirmar-se en una iteració hidràulica de detall. Si el límit imposat fos molt estricte, es podria reduir el nombre de passos per tubs o utilitzar tubs de diàmetre superior, assumint una velocitat menor o una carcassa diferent.

11.4.5. Justificació tècnica

La proposta és defensable perquè segueix una seqüència clara de predimensionament: es parteix del deure tèrmic, es fixa una temperatura raonable de sortida de l'aigua, es calcula la DTML, es determina una àrea mínima, se selecciona una geometria comercial i es comproven velocitat i relació L/D.

La decisió d'instal·lar 58,4 m^2 en lloc dels 46,2 m^2 mínims no és un sobredimensionament arbitrari. En un condensador parcial hi ha incerteses associades a l'equilibri vapor-líquid, als no condensables i al coeficient real de condensació. El marge del 26% ajuda a absorbir aquestes incerteses sense arribar a una mida poc realista.

Les dimensions principals també són habituals en equips comercials: tubs de 3/4 in, longitud de 10 ft, pitch 1,25·OD i carcassa aproximada de 560 mm de diàmetre interior.

11.4.6. Taula final de dades adoptades

Taula 11.34. Dades finals del disseny

Variable	Valor
Q	2672 kW
T_cond	113 ºC
Aigua de refrigeració	20 -> 40 ºC
Cabal d'aigua	32,0 kg/s = 116 m^3/h
DTML corregida	82,6 ºC
U suposat inicial	700 W/(m^2·K)
Àrea calculada	46,2 m^2
Àrea instal·lada	58,4 m^2
U brut requerit	554 W/(m^2·K)
U net estimat	665 W/(m^2·K)
Velocitat d'aigua en tubs	2,0 m/s
Relació L/D_s	5,45
Factor d'embrutiment total	0,0003 m^2·K/W
Calor latent efectiu	2152 kJ/kg

11.5. Càlcul requeriments aerorefrigerador

11.5.1. Objectiu de l'equip dins del procés

El procés utilitza Therminol 66 com a fluid de transferència de calor. El fluid s'impulsa cap als diferents equips a 265 ºC. En alguns equips el Therminol 66 cedeix calor i en dos reactors catalítics absorbeix calor. Com que tots els equips funcionen simultàniament, el primer pas és fer un balanç global del circuit.

L'objectiu del refrigerador és ajustar la temperatura del retorn mesclat perquè el fluid torni a estar disponible a 265,00 ºC abans de ser redistribuït al procés.

11.5.2. Base de disseny i dades de partida

Les dades següents provenen del dimensionament desenvolupat prèviament al xat. S'ha mantingut l'opció 1: el refrigerador es col·loca després de la mescla de tots els retorns del circuit.

Taula 11.35. Dades del procés per al requeriment

Equip	Efecte sobre el Therminol 66	Q (kW)	Cabal (kg/h)
Evaporador	Cedeix calor	1868,61	81440
Intercanviador de calor	Cedeix calor	1281,60	96202
Reboiler de columna	Cedeix calor	3541,70	111000
Reactor catalític 1	Absorbeix calor	3480,00	180000
Reactor catalític 2	Absorbeix calor	3480,00	180000

11.5.3. Hipòtesis adoptades

Taula 11.36. Hipòtesis adoptades per al disseny

Paràmetre	Valor adoptat
Operació simultània	Tots els equips indicats treballen alhora en el cas nominal.
Temperatura d'impulsió requerida	265,00 ºC.
Calor específic mitjà del Therminol 66	Cp = 2,3 kJ/(kg·K), valor aproximat per al rang 265-295 ºC.
Densitat mitjana del Therminol 66	rho = 780 kg/m3, valor aproximat per estimar cabal volumètric i diàmetres.
Marge de disseny tèrmic	Es passa de 268,09 kW calculats a 350 kW adoptats.
Tipus d'equip	Aero-refrigerador de tubs aletejats amb ventiladors axials, dissenyat a mida.

11.5.4. Metodologia general de selecció

La metodologia seguida és seqüencial:

- Determinar el balanç tèrmic global del circuit.
- Calcular la calor net que ha de retirar el refrigerador.
- Determinar el cabal total de Therminol 66 que passa per l'equip.
- Calcular l'increment de temperatura del retorn mesclat.
- Fixar les temperatures d'entrada i sortida del refrigerador.
- Comprovar el condicionant hidràulic del cabal.
- Triar una configuració modular que redueixi la pèrdua de càrrega.
- Seleccionar una família comercial d'equip que pugui fabricar-se a mida.

11.5.5. Balanç tèrmic del circuit

El Therminol 66 cedeix calor en tres equips i absorbeix calor en dos reactors. El refrigerador només ha de retirar l'excés net que queda després de compensar aquests efectes.

11.5.5.1. Calor total cedit pel Therminol 66

$$Q_cedit = Q_evaporador + Q_intercanviador + Q_reboiler$$

$$Q_cedit = 1868{,}61 + 1281{,}60 + 3541{,}70$$

$$Q_cedit = 6691{,}91\ kW$$

11.5.5.2. Calor total absorbit pel Therminol 66

$$Q_absorbit = Q_reactor\ 1 + Q_reactor\ 2$$

$$Q_absorbit = 3480{,}00 + 3480{,}00$$

$$Q_absorbit = 6960{,}00\ kW$$

11.5.5.3. Calor net a retirar

Com que la calor absorbida pels reactors és lleugerament més gran que la calor cedida als consumidors, el retorn mesclat queda una mica per sobre de 265 ºC.

$$Q_net = Q_absorbit - Q_cedit$$

$$Q_net = 6960{,}00 - 6691{,}91$$

$$Q_net = 268{,}09\ kW$$

11.5.6. Cabal total que passa pel refrigerador

En l'opció 1 tot el retorn mesclat passa pel refrigerador. Per tant, el cabal de disseny és la suma dels cabals parcials.

$$m_total = m_evaporador + m_intercanviador + m_reboiler + m_reactor\ 1 + m_reactor\ 2$$

$$m_total = 81440 + 96202 + 111000 + 180000 + 180000$$

$$m_total = 648642\ kg/h$$

$$m_total = 648642 / 3600$$

$$m_total = 180{,}18\ kg/s$$

11.5.7. Càlcul del salt tèrmic del refrigerador

La relació bàsica entre calor, cabal i temperatura és:

$$Q = m \cdot Cp \cdot DeltaT$$

D'aquí s'obté el salt tèrmic necessari:

$$DeltaT = Q / (m \cdot Cp)$$

$$DeltaT = 268{,}09 / (180{,}18 \cdot 2{,}3)$$

$$DeltaT = 0{,}65\ ºC$$

11.5.8. Temperatures d'entrada i sortida

La temperatura de sortida requerida és 265,00 ºC. Si el refrigerador ha de retirar un salt tèrmic de 0,65 ºC, la temperatura d'entrada del retorn mesclat serà:

$$T_entrada = T_sortida + DeltaT$$

$$T_entrada = 265{,}00 + 0{,}65$$

$$T_entrada = 265{,}65\ ºC$$

Taula 11.37. Paràmetres tèrmics d'entrada i sortida del fluid

Paràmetre	Valor adoptat
Temperatura d'entrada al refrigerador	265,65 ºC
Temperatura de sortida del refrigerador	265,00 ºC
Salt tèrmic al costat Therminol 66	0,65 ºC
Calor calculat a retirar	268,09 kW
Potència tèrmica adoptada	350 kW

11.5.9. Condicionant hidràulic: cabal volumètric

Per seleccionar un equip real no n'hi ha prou amb indicar els kW. També cal saber quin volum de fluid ha de travessar l'intercanviador. Es calcula amb la densitat aproximada del Therminol 66.

$$V = m / rho$$

$$V = 648642 / 780$$

$$V = 831{,}6\ m3/h$$

$$V = 831{,}6 / 3600$$

$$V = 0{,}231\ m3/s$$

Aquest és un cabal molt elevat per a un equip que només ha de retirar 350 kW. Per això la solució recomanada no és un refrigerador compacte d'oli hidràulic, sinó un aero-refrigerador industrial amb diversos passos o mòduls en paral·lel.

11.5.10. Estimació de diàmetres principals

Com a comprovació preliminar, es calcula el diàmetre necessari per mantenir velocitats raonables en el col·lector principal. Per a oli tèrmic, una velocitat de l'ordre d'1,5-2,5 m/s és una referència prudent en predimensionament.

$$D = sqrt(4 \cdot V / (pi \cdot v))$$

$$D = sqrt(4 \cdot 0{,}231 / (pi \cdot 2{,}0))$$

$$D = 0{,}383\ m$$

Per tant, es recomana una connexió principal de l'ordre de DN400. Aquesta dada no és una especificació mecànica final, sinó una orientació per evitar seleccionar un equip amb boques massa petites.

11.5.11. Modularització de l'equip

Per reduir la pèrdua de càrrega i repartir el cabal, es proposa dividir el servei en sis mòduls hidràulics en paral·lel.

$$m_modul = m_total / 6$$

$$m_modul = 648642 / 6$$

$$m_modul = 108107\ kg/h\ per\ mòdul$$

$$V_modul = 831{,}6 / 6$$

$$V_modul = 138{,}6\ m3/h\ per\ mòdul$$

$$Q_modul = 350 / 6$$

$$Q_modul = 58{,}3\ kW\ per\ mòdul$$

Taula 11.38. Magnituds modulars equips

Magnitud	Per mòdul	Total
Nombre de mòduls	1	6
Potència tèrmica	58,3 kW	350 kW
Cabal màssic	108107 kg/h	648642 kg/h
Cabal volumètric	138,6 m3/h	831,6 m3/h
Temperatures	265,65 -> 265,00 ºC	265,65 -> 265,00 ºC

11.5.12. Selecció de l'equip

L'equip seleccionat ha de ser un aero-refrigerador industrial de disseny a mida, amb tubs aletejats i ventiladors axials. No es recomana utilitzar un refrigerador d'oli hidràulic estàndard, perquè aquests equips habitualment estan pensats per temperatures molt inferiors i cabals molt més modestos.

Taula 11.39. Valors paràmetres equip seleccionat

Paràmetre	Valor adoptat
Equip seleccionat	Aero-refrigerador industrial de Therminol 66
Família comercial proposada	Alfa Laval ACE, Model E o equivalent engineered-to-order
Alternatives equivalents	Kelvion Air Fin Cooler; United Heat Exchangers Air Cooled Heat Exchanger
Potència tèrmica adoptada	350 kW
Potència elèctrica dels ventiladors	20-30 kW
Cabal de Therminol 66	648642 kg/h
Temperatura d'entrada/sortida	265,65 / 265,00 ºC

11.5.13. Dimensions i pes preliminars

Com que l'equip és de fabricació a mida, les dimensions finals depenen del fabricant.

Taula 11.40. Dimensions i pes de l'equip seleccionat

Paràmetre	Valor adoptat
Longitud estimada	8 m
Amplada estimada	5 m
Alçada estimada	3,5 m
Pes en buit estimat	10-12 t

11.6. Càlcul requeriments caldera

11.6.1. Objectiu del manual

L'objectiu és explicar, de manera ordenada i entenedora, la metodologia seguida per seleccionar una caldera d'oli tèrmic capaç de retornar al Therminol 66 la potència que havia cedit prèviament en un intercanviador de calor.

El resultat que es busca no és fabricar l'equip, sinó escollir un model comercial coherent amb el servei. Per això el manual separa tres nivells: dades del procés, càlculs de selecció i comprovacions que encara requeririen una oferta del fabricant o una enginyeria de detall.

11.6.2. Funció de l'equip dins del procés

El Therminol 66 surt d'un intercanviador de calor a 271 °C després d'haver cedit energia a un altre corrent del procés. Per continuar funcionant com a fluid tèrmic, cal tornar-lo a escalfar fins a 300 °C abans de retornar-lo al circuit de servei.

Taula 11.41. Funció de l'equip

Aspecte	Descripció
Funció principal	Aportar 3628 kW al Therminol 66.
Paper dins del procés	Reescalfament del fluid tèrmic després d'una pèrdua de calor en un intercanviador.
Tipus d'equip necessari	Caldera o escalfador d'oli tèrmic de circulació forçada.

11.6.3. Dades de partida

Taula 11.42. Dades del procés per a la selecció de l'equip

Magnitud	Símbol	Valor
Cabal màssic de Therminol 66	m	178373,5 kg/h
Temperatura d'entrada a la caldera	T_in	271 °C
Temperatura de sortida requerida	T_out	300 °C
Increment de temperatura	Delta T	29 °C

Magnitud	Símbol	Valor
Potència tèrmica requerida	Q	3628 kW
Fluid de treball	-	Therminol 66

11.6.4. Comprovació del fluid Therminol 66

Abans d'escollir la caldera, cal comprovar que la temperatura de treball proposada sigui compatible amb el fluid. Aquesta comprovació evita seleccionar un equip que obligui el Therminol 66 a operar fora del seu rang recomanat.

Taula 11.43. Propietats Therminol 66

Propietat de Therminol 66	Valor de referència
Temperatura màxima recomanada en massa	345 °C
Temperatura màxima de pel·lícula	375 °C
Punt d'ebullició normal	359 °C
Densitat aproximada a 280-290 °C	825-817 kg/m^3
Calor específic a 290-300 °C	2,53-2,57 kJ/(kg·K)

11.6.5. Metodologia de selecció pas a pas

La metodologia seguida és una metodologia de selecció comercial d'un escalfador d'oli tèrmic. No és el mètode de Kern, ja que Kern serveix per dimensionar intercanviadors de carcassa i tubs i aquí l'equip seleccionat és un generador de calor per combustió.

Taula 11.44. Metodologia de selecció de l'equip

Pas	Acció	Què es comprova
1	Definir el servei tèrmic	Identificar quin fluid s'escalfa, de quina temperatura a quina temperatura i amb quin cabal.
2	Comprovar el fluid	Verificar que Therminol 66 pot treballar a 300 °C sense superar el límit de temperatura en massa.

Pas	Acció	Què es comprova
3	Calcular o confirmar la potència	Aplicar Q = m · cp · Delta T o contrastar amb dades d'entalpia del fluid.
4	Convertir el cabal	Passar de kg/h a kg/s i estimar el cabal volumètric per comparar amb catàleg.
5	Definir el marge de selecció	Buscar un model de catàleg que cobreixi 3.628 kW sense quedar ni massa just ni excessivament sobredimensionat.
6	Comparar models propers	Rebutjar models insuficients i valorar el model immediatament superior o compatible.
7	Adoptar el model	Escollir el model que cobreix la potència i és coherent amb temperatures, cabal i aplicació.
8	Completar la fitxa de l'equip	Recollir dimensions, pes, consum de combustible, empresa, model i cost orientatiu.

11.6.6. Càlcul de la càrrega tèrmica

La potència tèrmica és l'energia per unitat de temps que la caldera ha d'entregar al Therminol 66. Per a un escalfament sensible, sense canvi de fase, s'utilitza:

$$Q = m \cdot cp \cdot DeltaT$$

on Q és la potència tèrmica, m és el cabal màssic, cp és la calor específica mitjana i Delta T és l'increment de temperatura del fluid.

11.6.6.1. Conversió del cabal màssic

$$m = 178373{,}5\ kg/h \cdot (1\ h\ /\ 3.600\ s) = 49{,}55\ kg/s$$

11.6.6.2. Increment de temperatura

$$Delta\ T = T_out - T_in = 300\ °C - 271\ °C = 29\ °C$$

11.6.6.3. Calor específic equivalent

Com que la potència requerida ja ve donada pel problema, es pot calcular quin cp mitjà implica aquesta potència:

$$cp = Q\ /\ (m \cdot Delta\ T)$$

$$cp = 3.628\,kW / (49{,}55\,kg/s \cdot 29\,K) = 2{,}53\,kJ/(kg \cdot K)$$

Aquest valor és coherent amb les dades de Therminol 66 al voltant de 290-300 °C. Per tant, la potència de 3.628 kW és tècnicament consistent amb el cabal i el salt tèrmic indicats.

11.6.6.4. Comprovació amb entalpia tabulada

Una forma més fina de comprovar el resultat és usar l'entalpia líquida del Therminol 66. A partir de la taula d'Eastman, l'entalpia a 270 °C és 556,7 kJ/kg i a 300 °C és 632,0 kJ/kg. Interpolant a 271 °C:

$$h_271 \approx 556{,}7 + (1/10) \cdot (581{,}4 - 556{,}7) = 559{,}2\,kJ/kg$$

$$Delta\,h = h_300 - h_271 = 632{,}0 - 559{,}2 = 72{,}8\,kJ/kg$$

$$Q \approx 49{,}55\,kg/s \cdot 72{,}8\,kJ/kg = 3.610\,kW$$

La diferència respecte als 3.628 kW és aproximadament del 0,5%, molt petita per a una selecció preliminar. Es manté com a base de disseny el valor indicat pel problema: 3.628 kW.

11.6.7. Conversió del cabal i cabal volumètric

Els catàlegs de calderes d'oli tèrmic solen donar rangs de cabal volumètric en m^3/h. Per això cal convertir el cabal màssic del procés a volumètric usant una densitat mitjana.

A 280 °C, la densitat tabulada és aproximadament 825 kg/m^3; a 290 °C és 817 kg/m^3. Per al servei 271-300 °C es pot adoptar una densitat mitjana aproximada de 821 kg/m^3.

$$V = m / rho = 178373{,}5\,kg/h / 821\,kg/m^3 = 217\,m^3/h$$

Taula 11.45. Caudals i densitat que hi passa per l'equip

Magnitud	Valor adoptat	Comentari
Cabal màssic	178.373,5 kg/h	Dada de procés.
Densitat mitjana adoptada	821 kg/m^3	Estimació a partir de dades tabulades del Therminol 66.
Cabal volumètric estimat	217 m^3/h	Valor útil per comparar amb catàleg i dimensionar bomba/tuberies.

11.6.8. Selecció del model comercial

La potència requerida és 3.628 kW. Per tant, el model seleccionat ha de poder entregar com a mínim aquesta potència en condicions de servei. En el catàleg de PIROBLOC, la línia GFT inclou models per a combustibles líquids o gasosos i potències fins a diversos MW.

Taula 11.46. Models PIROBLOC GTF

Model PIROBLOC	Rang de potència de catàleg	Decisió
GFT-200	2905-3258 kW	No serveix: queda per sota de 3.628 kW.
GFT-300	3488-4070 kW	Serveix: cobreix 3.628 kW dins del seu rang.
GFT-400	4651-5232 kW	Serveix però queda més sobredimensionat.

11.6.8.1. Factor de càrrega del model escollit

Per veure si el model queda molt forçat, es calcula la fracció de càrrega respecte a la potència màxima de catàleg:

$$Fracció\ de\ càrrega\ =\ 3.628\ /\ 4.070\ =\ 0{,}891\ =\ 89{,}1\ \%$$

Això indica que el GFT-300 treballaria prop de la seva part alta, però encara dins del rang de catàleg. També queda per sobre de la potència mínima del model:

$$3628\ /\ 3488\ =\ 1{,}040$$

És a dir, la potència requerida és un 4,0% superior al límit inferior del model i un 10,9 % inferior al límit superior. Aquesta és una selecció ajustada i raonable per a un predimensionament.

11.6.9. Consum de combustible i potència de combustió

La caldera no converteix el 100% de l'energia del combustible en calor útil al Therminol 66. Una part es perd amb els gasos de combustió i altres pèrdues. El catàleg de PIROBLOC indica rendiments tèrmics típics del 87-91% per a la línia GFT, i el full comercial complementari dona consums de gas natural i gasoil per al GFT-300.

Taula 11.47. Consum de combustible

Combustible	Consum de catàleg per GFT-300	Valor útil per al cas
Gas natural	395-460 Nm^3/h	El cas requerit queda dins d'aquest rang. Es pot usar aproximadament 400-410 Nm^3/h com a ordre de magnitud.
Gasoil lleuger	308-359 kg/h	Alternativa si no hi ha gas natural. El consum estimat seria al voltant de 320 kg/h.

11.6.9.1. Estimació pròpia amb rendiment

Si es pren un rendiment aproximat del 90 %, la potència que ha d'aportar el combustible és:

$$Q_comb = Q_útil / eta = 3.628\ kW / 0{,}90 = 4031\ kW$$

Aquesta potència de combustió és coherent amb el rang de consum de gas natural publicat per al GFT-300. En una compra real, el consum final s'hauria de confirmar amb el fabricant segons el poder calorífic real del gas i les condicions d'operació.

11.6.10. Dimensions, pes i implantació

El fabricant ofereix execució vertical o horitzontal. Per a una planta química, la versió horitzontal sol ser més senzilla de mantenir perquè facilita l'accés a portes i cremador. La versió vertical pot ser útil si la superfície disponible a planta és més limitada.

Taula 11.48. Mides i pes de l'equip seleccionat

Paràmetre	Valor per PIROBLOC GFT-300	Comentari
Longitud A, execució horitzontal	5560 mm	Dimensió principal en planta.
Amplada E, execució horitzontal	3345 mm	Amplada total aproximada amb elements auxiliars.
Altura C, execució horitzontal	3010 mm	Altura aproximada del cos de la caldera.

Paràmetre	Valor per PIROBLOC GFT-300	Comentari
Altura D, execució horitzontal	2930 mm	Cota alternativa de referència del fabricant.
Amplada F, execució horitzontal	2155 mm	Amplada parcial indicada al plànol de catàleg.
Pes buit	11000 kg	Pes aproximat de l'equip sense càrrega completa d'oli.
Pes en operació	13600 kg	Pes aproximat amb oli intern i condicions de servei.
Volum intern d'oli	1850 L	Volum dins la caldera; no inclou tot el circuit.
Diàmetre interior de xemeneia	600 mm	Referència de catàleg per a xemeneia de 8-10 m.

11.6.10.1. Comparació amb el cabal del circuit

El cabal volumètric estimat del procés és d'uns 217 m^3/h. El catàleg dona per al GFT-300 rangs de cabal nominal associats al salt tèrmic de disseny. Com que el salt tèrmic del procés és 29 °C, queda entre els casos típics de 20 °C i 40 °C. Això fa que el cabal estimat sigui plausible per al model.

11.7. Torre de refrigeració

Aquest manual explica, pas a pas, la metodologia seguida per seleccionar de manera preliminar una torre de refrigeració per a l'aigua de servei d'un procés químic. L'aigua freda surt de la torre i alimenta tres equips: un bescanviador post-reactor, el condensador d'una columna de destil·lació i un bescanviador de refredament del producte final.

L'objectiu pràctic és transformar les dades de procés disponibles en una especificació de compra defensable: cabal d'aigua, potència tèrmica a dissipar, temperatures d'entrada i sortida, capacitat en tones de refrigeració, model comercial, dimensions, pes i ordre de magnitud del cost.

11.7.1. Descripció del sistema de refrigeració

La torre treballa com a equip central de dissipació de calor. L'aigua de servei entra als equips de procés a 20 °C, absorbeix calor i retorna a la torre a una temperatura més alta. Com que els tres serveis treballen en paral·lel, cada corrent té el seu propi salt tèrmic; abans d'entrar a la torre, els retorns es barregen.

- **Servei 1 (E-301):** refredament post-reactor, amb càrrega tèrmica elevada i gran cabal d'aigua.
- **Servei 2 (CN-301):** condensador de la columna de destil·lació, amb menor cabal però salt tèrmic més alt.
- **Servei 3 (E-303):** refredament del producte final, amb cabal intermedi-baix i càrrega tèrmica moderada.

Equip seleccionat: torre oberta de tir induït i flux creuat, de dues cel·les, adequada per a cabals industrials grans.

11.7.2. Dades de partida

Les dades de partida són les facilitades per al procés. Es consideren dades de disseny preliminar, no una especificació mecànica final.

Taula 11.49. Dades del procés per a la selecció de l'equip

Servei	Cabal d'aigua (kg/h)	Calor absorbit (kW)	T entrada a l'equip (°C)
Bescanviador post-reactor	460047	5341,7	20,0
Condensador torre destil·lació	115200	2672,0	20,0
Bescanviador producte final	75631	1317,0	20,0

La calor indicada és la que absorbeix l'aigua dins de cada equip. Per tant, aquesta mateixa calor és la que, de manera global, haurà de rebutjar la torre de refrigeració cap a l'atmosfera.

11.7.3. Hipòtesis adoptades

Per poder fer el predimensionament, s'adopten hipòtesis senzilles i habituals en una primera selecció d'equip. Aquestes hipòtesis s'han de revisar si es disposa de dades de planta més precises.

Taula 11.50. Hipòtesis del procés per a la selecció del equip

Hipòtesi	Valor adoptat	Justificació
Calor específica de l'aigua	cp = 4,18 kJ/(kg·K)	Valor típic per a aigua líquida en l'interval 20-40 °C.
Densitat de l'aigua	rho = 1000 kg/m3	Aproximació suficient per convertir kg/h a m3/h en predimensionament.
Entrada d'aigua als equips	20 °C	Dada de procés indicada.
Treball dels serveis	En paral·lel	Cada equip rep aigua a 20 °C i retorna a diferent temperatura.
Pèrdues tèrmiques en canonades	No considerades	Sense dades d'implantació; el càlcul és lleugerament optimista.
Bulb humit ambiental	No disponible	És el principal límit per confirmar si la torre pot garantir 20 °C.

11.7.4. Metodologia de càlcul pas a pas

11.7.4.1. Balanç tèrmic en cada servei

El primer pas és calcular quant s'escalfa l'aigua en cada equip. Es fa amb un balanç d'energia sensible sobre l'aigua:

$$Q_i = m_i \cdot cp \cdot (T_sortida, i - T_entrada)$$

On Q_i és la potència tèrmica absorbida per l'aigua, m_i és el cabal màssic, cp és la calor específica i T és la temperatura.

Com que el cabal està en kg/h i Q està en kW, cal tenir cura amb les unitats. Recordem que 1 kW = 1 kJ/s, i per això apareix el factor 3600 s/h:

$$DeltaT_i = Q_i \cdot 3600 / (m_i \cdot cp)$$

Taula 11.51. Balanços tèrmics equips que fan servir aquest fluid de procés

Servei	Substitució	DeltaT (°C)	T sortida equip (°C)
Post-reactor	5341,7·3600/(460047·4,18)	10,00	30,00
Condensador destil·lació	2672·3600/(115200·4,18)	19,98	39,98
Producte final	1317·3600/(7631·4,18)	15,00	35,00

La Taula 11.51 és important perquè mostra que la torre no rep tres retorns iguals. El retorn del condensador és el més calent, perquè té una càrrega gran repartida en un cabal més petit.

11.7.4.2. Cabal total que ha de circular per la torre

Com que els tres cabals tornen a la mateixa torre, el cabal total és la suma dels cabals individuals:

$$m_total = 460047 + 115200 + 75631 = 650.878\ kg/h$$

$$V_total = 650878 / 1000 = 650{,}878\ m3/h$$

Aquest és el cabal hidràulic que s'ha d'utilitzar per buscar una torre comercial capaç de treballar en aquest rang.

11.7.4.3. Potència tèrmica total a dissipar

La potència tèrmica total de la torre és la suma de les potències absorbides en els tres equips:

$$Q_total = 5341{,}7 + 2672 + 1317 = 9330{,}7\ kW$$

Aquest valor és la potència tèrmica de procés que la torre ha de rebutjar a l'ambient. No s'ha de confondre amb la potència elèctrica del ventilador.

11.7.4.4. Temperatura de retorn mesclat a la torre

La temperatura d'entrada a la torre es pot calcular de dues maneres equivalents: fent la mitjana ponderada dels retorns o aplicant el balanç global. La forma més directa és:

$$DeltaT_total = Q_total \cdot 3600 / (m_total \cdot cp)$$

$$DeltaT_total = 9330{,}7 \cdot 3600/(650878 \cdot 4{,}18) = 12{,}35\ °C$$

$$T_entrada, torre = 20{,}0 + 12{,}35 = 32{,}35\ °C$$

Per tant, la torre seleccionada ha de refredar aproximadament 650,9 m3/h d'aigua des de 32,35 °C fins a 20,0 °C.

11.7.4.5. Conversió de la càrrega a tones de refrigeració

Molts catàlegs de torres utilitzen tones de refrigeració, TR. La conversió habitual és:

$$1\ TR = 3{,}51685\ kW$$

$$Capacitat\ requerida = 9330{,}7 / 3{,}51685 = 2653\ TR$$

Aquesta conversió permet comparar la necessitat del procés amb la capacitat nominal dels models comercials.

11.7.4.6. Cabal en unitats de catàleg

Els catàlegs nord-americans també utilitzen US gpm. La conversió aproximada és:

$$1\ m3/h = 4{,}4029\ US\ gpm$$

$$650{,}878\ m3/h \cdot 4{,}4029 = 2866\ US\ gpm$$

El catàleg de la sèrie seleccionada indica que la gamma pot arribar fins a cabals de procés de 4500 US gpm, de manera que el cabal calculat queda dins del rang d'ús del fabricant.

11.7.4.7. Comprovació preliminar de viabilitat tèrmica

Una torre evaporativa no pot refredar l'aigua per sota del bulb humit ambiental. Per això, encara que el balanç energètic indiqui que cal sortir a 20 °C, aquesta temperatura només és viable si el bulb humit de disseny és prou baix.

$$Approach = T_aigua\ freda - T_bulb\ humit$$

Si es pren un approach típic preliminar de 4-5 °C, per obtenir aigua a 20 °C caldria un bulb humit de disseny aproximat de 15-16 °C. Si el bulb humit real d'estiu és superior, la torre no podrà garantir 20 °C sense suport addicional, com una refredadora.

11.7.4.8. Estimació auxiliar de consum d'aigua

Com a orientació operativa, es pot estimar l'aigua evaporada dividint la càrrega tèrmica per la calor latent de vaporització de l'aigua. S'adopta hfg = 2450 kJ/kg com a valor aproximat.

$$m_evap = Q_total / hfg = 9330{,}7\ kJ/s / 2450\ kJ/kg = 3{,}81\ kg/s$$

$$m_evap = 3{,}81 \cdot 3600 = 13710\ kg/h \approx 13{,}7\ m3/h$$

Si es treballés, per exemple, amb 4 cicles de concentració, la purga preliminar seria:

$$Purga \approx Evaporació/(COC - 1) = 13{,}7/(4 - 1) = 4{,}6\ m3/h$$

Aigua d'aportació ≈ 13,7 + 4,6 = 18,3 m3/h, sense incloure arrossegaments ni pèrdues menors

Aquest apartat no substitueix el disseny de tractament d'aigua, però ajuda a entendre que una torre oberta consumeix aigua per evaporació i requereix purga per controlar sals.

11.7.5. Selecció comercial de la torre

La selecció comercial es fa comparant la capacitat requerida amb una gamma de torres industrials. Es tria un model amb capacitat nominal lleugerament superior a la calculada, dimensions realistes i dades de catàleg completes.

Taula 11.52. Característiques model seleccionat

Criteri	Necessitat del procés	Model seleccionat
Tipus d'equip	Torre evaporativa oberta	Torre BAC Series 3000, tir induït, flux creuat, doble cel·la
Capacitat tèrmica	2653 TR	2748 TR

Criteri	Necessitat del procés	Model seleccionat
Cabal d'aigua	2866 US gpm	Gamma apta per a aplicacions de procés fins a 4500 US gpm
Temperatures de servei	32,35 °C -> 20,0 °C	Selecció pendent de confirmar amb bulb humit local
Potència elèctrica	No és dada de procés	238 HP = 177 kW aprox.

El model adoptat és BAC Series 3000 S3E-1424-14U-2. El marge de capacitat respecte a la necessitat calculada és:

$$Marge = (2748 - 2653) / 2653 \cdot 100 = 3{,}6\,\%$$

11.7.6. Resultats finals adoptats

Taula 11.53. Resultats finals procés amb l'equip seleccionat

Resultat	Valor final per al manual
Cabal total d'aigua de refrigeració	650878 kg/h = 650,9 m3/h
Temperatura d'aigua freda requerida	20,0 °C
Temperatura de retorn mesclat	32,35 °C
Salt tèrmic global	12,35 °C
Càrrega tèrmica total	9330,7 kW
Capacitat equivalent	2.653 TR
Model seleccionat	BAC Series 3000 S3E-1424-14U-2
Capacitat nominal model	2.748 TR
Marge tèrmic nominal	3,6 %
Potència elèctrica ventilador	177 kW aprox.
Dimensions L x A x H	8,59 m x 7,34 m x 6,83 m
Pes buit	22915 kg

11.8. Disseny dels tancs d'emmagatzematge

Per realitzar el disseny tant físic com mecànic dels tancs d'emmagatzematge s'ha realitzat mitjançant el codi de disseny API 650[1], ja que aquestes substàncies seran emmagatzemades a pressió atmosfèrica.

Els productes a emmagatzemar són el metanol, el qual és un reactiu, i el formaldehid al 37%, el qual és el nostre producte d'interès.

Per tal de realitzar els càlculs, s'han utilitzat uns paràmetres en funció del material fet servir, els quals es mostren a la Taula 11.54.

Taula 11.54 *Paràmetres pel disseny dels tancs d'emmagatzematge.*

Material	S_d(MPa)	S_t(MPa)	ρ (kg/m^3)	CA (mm)	E
AISI 316L	145	155	7950	2,5	0,85

11.8.1. Disseny API 650

A continuació es detallen els passos que s'han seguit per tal de dissenyar els tancs a pressió atmosfèrica seguint el codi de disseny API 650.

11.8.1.1. Disseny del fons

Per al disseny dels tancs s'ha escollit dimensionar el fons pla, els quals solen ser utilitzats en tancs on la pressió no és massa elevada. La restricció per tal de fer servir aquest tipus de fons és que la resistència permissible del sòl sigui de com a mínim 1,465 kg/cm2. El terreny de la nostra parcel·la disposa d'una resistència del terreny de 2kg/cm2 a 1,5 m de profunditat, per tant, és vàlid la utilització d'aquest tipus de fons per als tancs.

Tabla 11.55. *Gruix mínim del fons (mm).*

Espessor mínim del cos (mm)	Esforç calculat per hidrostàtica en el primer anell del cos (kg/cm2)			
	< 1989	< 2109	< 2320	< 2530
t < 19,05	6,35	6,35	7,14	8,73
19,05 < t < 25,4	6,35	7,14	9,52	11,11
25,4 < t < 31,75	6,35	8,73	11,91	14,28
31,75 < t < 38,10	7,93	11,11	14,28	17,46
38,10 < t < 44,45	8,73	12,7	15,87	19,05

Respecte a les plaques, s'utilitzen plaques les quals tenen un gruix de corrosió nominal mínim de 6,35 mm, sense tenir en compte qualsevol corrosió permissible especificada. Per tant, el gruix de corrosió serà l'espessor menys la tolerància a la corrosió del material, tal com s'indica en l'equació:

$$\mathrm{CT} = \mathrm{t} - \mathrm{CA}$$

On:

CT: $Gruix\ de\ corrosió\ (mm)$

t: $Espessor\ del\ fons\ (mm)$

CA: $Tolerància\ a\ la\ corrosió\ del\ material\ (mm)$

El diàmetre exterior del fons ha de ser superior al diàmetre del cos del tanc, com a mínim ha de tenir 50 mm més:

$$D_{fons} = D_{e,fons} + 0{,}05m$$

On:

D_{fons}: $Diàmetre\ la\ fons\ inferior\ (m)$

$D_{e,fons}$: $Diàmetre\ del\ tanc\ (m)$

11.8.1.2. Disseny del cos

L'espessor del cos s'ha realitzat mitjançant el mètode d'un peu (1-Foot Method), el qual es pot fer servir per a diàmetres menors de 61 m. Amb aquest mètode es calcula l'espessor requerit del cos del tanc per condicions de disseny i de prova hidroestàtica. La prova hidroestàtica dona informació de l'espessor del tanc en el cas que aquest estigues omplert amb aigua en comptes d'amb la substància a emmagatzemar. L'espessor mínim requerit del cos serà el valor més gran entre els calculats per condicions de disseny o prova hidroestàtica. Les dues equacions utilitzades són les següents:

$$t_d = \frac{4{,}9D(H - 0{,}3)G}{S_d \cdot E} + CA$$

$$t_t = \frac{4{,}9D(H - 0{,}3)G}{S_t \cdot E}$$

On:

td: $Espessor\ en\ condicions\ de\ disseny\ (mm)$

tt: $Espessor\ en\ prova\ hidrostàtica\ (mm)$

D: $Diàmetre\ nominal\ del\ tanc\ (m)$

H: $Nivell\ del\ líquid\ de\ disseny\ (m)$

G: $Gravetat\ específica\ de\ disseny\ del\ líquid\ a\ emmagatzemar$

Sd: $Tensió\ admissible\ en\ condicions\ de\ disseny\ (MPa)$

St: $Tensió\ admissible\ en\ prova\ hidrostàtica\ (MPa)$

CA: $Tolerància\ a\ la\ corrosió\ (mm)$

E: $Valor\ de\ examinació\ radiogràfica\ de\ les\ juntes$

L'espessor mínim que ha de tenir el cos del tanc està directament relacionat amb el diàmetre nominal del tanc com es mostra en la taula a continuació:

Taula 11.56. Espessor mínim en funció de diàmetre.

Diàmetre nominal del tanc (m)	Espessor mínim del cos (mm)
< 15,24	4,76
15,24 < 36,576	6,35
36,576 < 60,96	7,93
> 60,96	9,52

Com els tancs que han de dissenyar no superen un diàmetre nominal del tanc de 15,24 m, l'espessor mínim del cos serà de 4,76 mm.

11.8.1.3. Disseny del sostre

Els tancs d'emmagatzematge a dissenyar constaran de sostre tipus fix i seran cònics i autosuportats. Aquests sostres solen estar dissenyats i calculats per tancs que no superin un diàmetre d'uns 18,288 m, sent recomanable dissenyar-los en tancs com un diàmetre inferior a 12,192 m. Indiferentment de la seva forma o mètode de suport utilitzat, els sostres són dissenyats per suportar una càrrega viva de com a mínim 1,76 kg/cm2 a més de la càrrega morta ocasionada pel mateix tanc. Les plaques fetes servir en el sostre han de tenir com a mínim un gruix nominal de 4,76mm.

Aquest tipus de sostre han de tenir un angle entre 9,5 i 37 graus. Així que es considera un valor de 15 graus respecte a l'horitzontal. El gruix del sostre vindrà calculat per la següent equació:

$$T_t = \frac{D}{4800 \sin \theta} + CA$$

On:

Tt: $Espessor\ mínim\ requerit\ (cm)$

D: $Diàmetre\ del\ tanc\ (cm)$

θ: $Angle\ respecte\ a\ la\ horitzontal\ (º)$

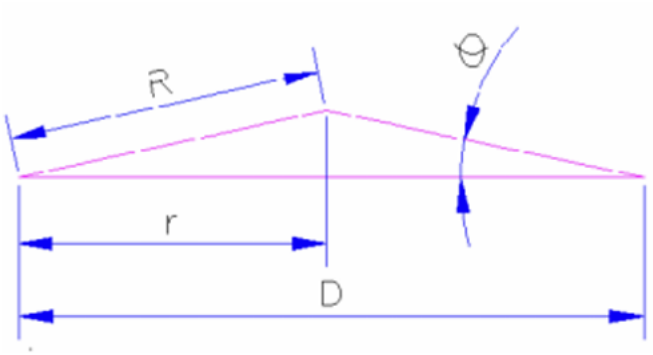


Figura 11.5. Esquema del sostre cònic

- **Pes dels tancs buits**

La gran majoria dels tancs a pressió atmosfèrica són de forma cilíndrica, per tant, aplicant la fórmula del volum d'un cilindre i multiplicant aquest per la densitat del material s'obté la següent equació:

$$V_{cos} = \frac{\pi}{4} \cdot (D_e^2 - D_i^2) \cdot H$$

On:

$Vcos$: $Volum\ del\ cos\ (m3)$

ρ: $Densitat\ material\ del\ tanc\ (kg/\ m3)$

De: $Diàmetre\ exterior\ del\ tanc\ (m)$

Di: $Diàmetre\ interior\ del\ tanc\ (m)$

H: $Alçada\ del\ tanc\ (m)$

- **Volum del capçal cònic**

El capçal és cònic, per tant, aplicant la fórmula del volum d'un con i multiplicant aquest per la densitat del material s'obté:

$$V_{con} = \frac{\pi}{3} \cdot (r_e^2 - r_i^2) \cdot H_{con}$$

On:

$Vcon$: $Volum\ del\ con\ (m3)$

ρ: $Densitat\ material\ del\ tanc\ (kg/\ m3)$

re: $Radi\ exterior\ del\ capçal\ cònic\ (m)$

ri: $Radi\ interior\ del\ capçal\ cònic\ (m)$

$Hcon$: $Alçada\ del\ con\ (m)$

- **Volum del fons inferior**

El fons inferior és cilíndric, per tant, aplicant la fórmula del volum un cilindre i multiplicant aquets per la densitat del material s'obté:

$$V_{fons} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{fons}^2 \cdot t$$

On:

V_{fons}: $Volum\ del\ fons\ inferior\ (m3)$

ρ: $Densitat\ material\ del\ tanc\ (kg/\ m3)$

$Dfons$: $Diàmetre\ del\ fons\ inferior\ (m)$

t: $Gruix\ del\ fons\ inferior\ (m)$

Per tant, el pes total del tanc buit és:

$$M_{total\ buit} = \left(V_{cos} + V_{con} + V_{fons}\right) \cdot \rho_{acer}$$

- **Pes del tanc ple d'aigua**

Per tant, el pes total del tanc buit és:

$$M_{total\ buit} = \left(V_{cos} + V_{con} + V_{fons}\right) \cdot \rho_{acer}$$

- **Volum del cos**

La gran majoria dels tancs a pressió atmosfèrica són de forma cilíndrica, per tant, aplicant la fórmula del volum d'un cilindre i multiplicant aquest per la densitat del material s'obté la següent fórmula:

$$V_{cos} = \frac{\pi}{4} \cdot (D_i^2) \cdot H$$

- **Volum del capçal cònic**

El capçal és cònic, per tant, aplicant la fórmula del volum d'un con i multiplicant aquest per la densitat del material s'obté:

$$V_{con} = \frac{\pi}{4} \cdot (r_i^2) \cdot H_{con}$$

- **Volum del fons inferior**

El fons inferior és cilíndric, per tant, aplicant la fórmula del volum un cilindre i multiplicant aquests per la densitat del material s'obté:

$$V_{fons} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{fons}^2 \cdot t$$

Per tant, el pes total del tanc buit és:

$$M_{total\ aigua} = \left(V_{cos} + V_{con} + V_{fons}\right) \cdot \rho_{aigua}$$

- **Pes del tanc ple**

$$M_{total\ ple} = M_{total\ buit} + V_{líquid} \cdot \rho_{líquid}$$

11.8.2. Tanc d'emmagatzematge metanol

El primer pas abans de determinar els valors del gruix i pes dels tancs, és determinar quants dies de reserva de metanol es vol emmagatzemar a la planta. En aquest cas s'ha considerat que el més adient és tenir una reserva de 3 dies, així en cas que sorgeixin qualsevol problema logístic, no tindríem un dèficit de metanol i la planta podria continuar produint.

La necessitat de metanol fresc que es necessiten en el procés és de 165,200 kmol/h.

$$165{,}200\,\frac{kmol}{h} \cdot 32{,}04\,\frac{kg}{kmol} \cdot 24\,\frac{h}{dia} = 1{,}27 \cdot 10^5$$

$$1\,\frac{kg}{d} \cdot \frac{1m^3}{790kg} \cdot 3dies = 482{,}4m^3$$

El volum dels tancs d'emmagatzematge de metanol es consideren tancs de $278m^3$, els quals el seu nivell d'operació estarà en el 85%, gràcies al factor de seguretat aplicat, el qual és del 15%.

$$\frac{482{,}4}{2tancs} = 241{,}2$$

$$241{,}2, m^3 \cdot 1{,}15 = 278m^3$$

Un cop decidit el volum, es procedeix a determinar el diàmetre i l'alçada dels tancs a partir d'aquest. La relació típicament utilitzada entre l'altura i el diàmetre sol ser d'1,5 per tancs a pressió atmosfèrica. Tenint en compte aquesta relació i el volum del tanc de 278 m3, s'obté:

$$Diàmetre, D = 6{,}175m$$

$$Alçada, H = 9{,}262m$$

Gràcies al factor de seguretat del 15%, el nivell del líquid serà un 85%.

$$Nivell\ de\ líquid = \frac{241{,}2}{278} \cdot 9{,}262 = 8{,}04m$$

- **Càlcul de l'espessor del cos**

Per calcular l'espessor del cos del tanc de metanol s'ha realitzat mitjançant les equacions 11.2.3 i 11.2.4:

$$t_d = \frac{4{,}9 \cdot 6{,}175m(9{,}262m - 0{,}3) \cdot 0{,}79}{145\ MPa \cdot 0{,}85} + 2{,}5mm = 4{,}24mm$$

$$t_t = \frac{4{,}9 \cdot 6{,}175m(9{,}262m - 0{,}3) \cdot 0{,}79}{155\ MPa \cdot 0{,}85} = 1{,}63mm$$

Una vegada calculat l'espessor en condicions d'operació i de prova hidroestàtica, s'agafa el valor més elevat, que en aquest cas és l'espessor en condicions d'operació amb 4,24 mm i es procedeix a calcular el diàmetre extern del cos.

$$D_{ext} = D_{int} + 2 \cdot t_d$$

$$D_{ext} = 6{,}175 + 2 \cdot 0{,}00424 = 6{,}1835m$$

- **Càlcul sostre cònic auto suportat**

Aquest espessor es calcula. L'angle que s'ha escollit és 15 graus respecte l'horitzontal.

$$T_t = \frac{617{,}5cm}{4800 \sin 15} + 0{,}25cm = 0{,}7470cm = 7{,}47mm$$

Taula 11.57. Paràmetres sostre cònic

Paràmetre	Valor
Tt (mm)	7,47
r (m)	3,095
R (m)	3,204
H (cm)	82,93
Di (m)	6,18
De (m)	6,19
θ (graus)	15

- **Càlcul del fons inferior**

Com s'ha comentat anteriorment, el fons inferior no pot tenir un gruix per sota de 6,35 mm, per tant, sabent la tolerància a la corrosió de l'acer inoxidable 316L, el qual és 2,5 mm, es pot calcular l'espessor del fons inferior.

$$t = CT + CA = 6{,}35 \text{ mm} + 2{,}5 \text{ mm} = 8{,}85 \text{ mm}$$

El diàmetre del fons inferior es calcula segons l'Equació 11.2.2.

$$D_{fons} = 6{,}175m + 0{,}05m = 6{,}225m$$

- **Alçada total del tanc**

$$H_{total} = 0{,}8293 + 9{,}262 + 0{,}00885 = 10{,}10m$$

- **Volum del cos**

$$V_{cos} = \frac{\pi}{4} \cdot (6{,}1835^2 - 6{,}175^2) \cdot 9{,}262 = 0{,}7642m^3$$

- **Volum del capçal cònic**

$$V_{con} = \frac{\pi}{3} \cdot (3{,}095^2 - 3{,}0875^2) \cdot 0{,}8293 = 0{,}0403m^3$$

- **Volum del fons inferior**

$$V_{fons} = \frac{\pi}{4} \cdot 6{,}225^2 \cdot 0{,}00885 = 0{,}2693m^3$$

- **Pes total de tanc buit**

$$M_{total} = (0{,}7642 + 0{,}0403 + 0{,}2693) \cdot 7950 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} = 8536.71\text{kg}$$

- **Pes total del tanc ple**

$$M_{total\ ple} = 8536.71\text{kg} + \left(241{,}2m^3 \cdot 790 \frac{kg}{m^3}\right) = 199084.71kg$$

11.8.3. Tanc d'emmagatzematge formaldehid

El primer pas abans de determinar els valors del gruix i pes dels tancs, és determinar quants dies pot estar el formaldehid emmagatzemat a la planta. En aquest cas s'ha considerat que el més adient és tenir espai per 3 dies, així en cas que sorgeixin qualsevol problema logístic, no tindríem etilbenzè el qual no se sap on emmagatzemar fins a la seva sortida de planta.

La producció de formaldehid en aquest procés és de 155,754 kmol/h.

$$155{,}754\frac{kmol}{h}\cdot\frac{30{,}03}{0{,}37}\frac{kg}{kmol}\cdot 24\frac{h}{dia}=3{,}03\cdot 10^5$$

$$1{,}12\cdot 10^5\frac{kg}{d}\cdot\frac{1m^3}{1080kg}\cdot 3dies=842{,}76m^3$$

El volum dels tancs d'emmagatzematge de formaldehid es consideren tancs de 485m3, els quals el seu nivell d'operació estarà en el 85%, gràcies al factor de seguretat aplicat, el qual és del 15%.

$$\frac{842{,}76}{2tancs}=421{,}38m^3$$

$$421{,}38m^3\cdot 1{,}15=485m^3$$

Un cop decidit el volum, es procedeix a determinar el diàmetre i l'alçada dels tancs a partir d'aquest. La relació típicament utilitzada entre l'altura i el diàmetre sol ser d'1,5 per tancs a pressió atmosfèrica. Tenint en compte aquesta relació i el volum del tanc de 476 m^3, s'obté:

$$Diàmetre, D=7{,}44m$$

$$Alçada, H=11{,}16m$$

Gràcies al factor de seguretat del 15%, el nivell del líquid serà un 85%.

$$Nivell\ de\ líquid=\frac{421{,}38}{485}\cdot 11{,}16=9{,}696m$$

- **Càlcul de l'espessor del cos**

Per calcular l'espessor del cos del tanc del formaldehid s'ha realitzat mitjançant:

$$t_d=\frac{4{,}9\cdot 7{,}44m(11{,}16m-0{,}3)\cdot 1{,}085}{145\ MPa\cdot 0{,}85}+2{,}5mm=5{,}99mm$$

$$t_t=\frac{4{,}9\cdot 7{,}44m(11{,}16m-0{,}3)\cdot 1{,}085}{155\ MPa\cdot 0{,}85}=3{,}26mm$$

Una vegada calculat l'espessor en condicions d'operació i de prova hidroestàtica, s'agafa el valor més elevat, que en aquest cas és l'espessor en condicions d'operació amb 5,99 mm i es procedeix a calcular el diàmetre extern del cos.

$$D_{ext} = D_{int} + 2 \cdot t_d$$

$$D_{ext} = 7{,}44 + 2 \cdot 0{,}00599 = 7{,}452m$$

- **Càlcul sostre cònic auto suportat**

Aquest espessor es calcula mitjançant l'Equació X. L'angle que s'ha escollit és 15 graus respecte a l'horitzontal.

$$T_t = \frac{744cm}{4800 \sin 15} + 0{,}25cm = 0{,}8489cm = 8{,}49mm$$

Taula11.58. Paràmetres sostre cònic tanc formaldehid

Paràmetre	Valor
Tt (mm)	8,49
r (m)	3,726
R (m)	3,857
H (cm)	99,84
Di (m)	7,44
De (m)	7,452
θ (graus)	15

- **Càlcul del fons inferior**

Com s'ha comentat anteriorment, el fons inferior no pot tenir un gruix per sota de 6,35 mm, per tant, sabent la tolerància a la corrosió de l'acer inoxidable 316L, el qual és 2,5 mm, es pot calcular l'espessor del fons inferior.

$$t = CT + CA = 6{,}35\ \text{mm} + 2{,}5\ \text{mm}\ = 8{,}85\ \text{mm}$$

El diàmetre del fons inferior es calcula:

$$D_{fons} = 7{,}452m + 0{,}05m = 7{,}5m$$

- **Alçada total del tanc**

$$H_{total} = 0{,}9984 + 11{,}16 + 0{,}00885 = 12{,}17m$$

- **Volum del cos**

$$V_{cos} = \frac{\pi}{4} \cdot (7{,}452^2 - 7{,}44^2) \cdot 11{,}16 = 1{,}57m^3$$

- **Volum del capçal cònic**

$$V_{con} = \frac{\pi}{3} \cdot (3{,}726^2 - 3{,}72^2) \cdot 0{,}9984 = 0{,}0467m^3$$

- **Volum del fons inferior**

$$V_{fons} = \frac{\pi}{4} \cdot 7{,}5^2 \cdot 0{,}00885 = 0{,}39m^3$$

- **Pes total de tanc buit**

$$M_{total} = (1{,}57 + 0{,}0467 + 0{,}39) \cdot 7950\,\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} = 15.953{,}27\text{kg}$$

- **Pes total del tanc ple**

$$M_{total\ ple} = 15953{,}27\text{kg} + \left(421{,}38m^3 \cdot 1080\,\frac{kg}{m^3}\right) = 471.043{,}67kg$$

11.8.4. Càlcul de distàncies de seguretat de l'emmagatzematge

11.8.4.1 Distància al límit de propietat tancs metanol

- **Distància base:** D'acord amb el Cuadro III-1, la intersecció entre un recipient de Classe B (3.2) i el límit de propietat (10) estableix una distància base de 30 m.
- **Coeficient per capacitat:** Per un volum de 278 m^3 (200 < Q < 500), el Cuadro III-2 assigna un coeficient de 0,4.
- **Coeficient per protecció:** En disposar de sistemes fixos de protecció de Nivell 2 (aigua i escuma automàtica), el Cuadro III-4 permet aplicar un factor de 0,50.
- **Càlcul reduït:** $30 \cdot 0{,}6 \cdot 0{,}50 = 6\,m$
- **Ajust legal mínim:** L'Article 17.1.e estableix un límit inferior infranquejable de 12 m per a productes de la subclasse B1.

Per tant la distància entre els tancs i el límit de la propietat serà de 12 metres.

11.8.4.2. Càlcul de dimensionament de la cubeta tancs metanol

Es decideix construir la cubeta de forma quadrada:

11.8.4.3. Dades de partida

- **Volum de la suma dels tancs:** 556 m^3
- **Capacitat requerida:** 100% de Volum total
- **Alçada mur:** Fixem 1,5 m (alçada recomanada per Reial decret 656/2017)
- **Marge de seguretat:** 0,2 m (per evitar desbordament per pluja)
- **Alçada útil:** 1,5m-0,2m= 1,3 m

11.8.4.4. Càlcul de la superfície necessària

Per encabir el volum requerit amb l'alçada útil definida, la superfície lliure de la cubeta ha de ser:

$$S = 556\,m^3/1{,}3\,m = 427{,}69\,m^2$$

11.8.4.5. Determinació de les dimensions geomètriques

$$Costat = arrel\,(427{,}69\,m^2) = 20{,}66\,m$$

Per tant es fa amb 21 m de ample i 21 m de llarg . Això permet també garantir el 1 metre al voltant del tanc que s'ha de deixar per garantir el pas de les inspeccions.

11.8.4.6. Verificació de la capacitat neta

$$V = 21 \cdot 21 \cdot 1{,}3\ m = 573{,}3\ m^3$$

Per tant si podrà contenir els 556m^3 i tindrà els 0,2 metres de marge de seguretat per evitar desbordament per pluja .

11.8.7. Distància al límit de propietat tancs formaldehid

- **Distància base :** D'acord amb el Cuadro III-1, la intersecció entre un recipient de Classe B (3.2) i el límit de propietat (10) estableix una distància base de 30 m.
- **Coeficient per capacitat :** Per un volum de 485 m^3 (200< Q < 500), el Cuadro III-2 assigna un coeficient de 0,4.
- **Coeficient per protecció :** En disposar de sistemes fixos de protecció de Nivell 2 (aigua i escuma automàtica), el Cuadro III-4 permet aplicar un factor de 0,50.
- **Càlcul reduït:** $30 \cdot 0{,}4 \cdot 0{,}50 = 6\ m$
- **Ajust legal mínim:** L'Article 17.1.e estableix un límit inferior infranquejable de 8 m per a productes de la subclasse B2. Per tant seran 8 metres la distància del tanc amb el límit de propietat.

11.9. Disseny de la columna d'absorció

En el procés es disposa d'una columna d'absorció, identificada com a AC-301, la qual té com a objectiu principal absorbir formaldehid del corrent gasós mitjançant l'ús d'aigua com a dissolvent. Aquesta operació permet reduir la concentració d'aquest component en el corrent gasós de sortida i recuperar-los en la fase líquida.

Per al disseny de la columna d'absorció s'ha utilitzat el programa Aspen HYSYS, a partir de les condicions d'operació obtingudes en els balanços de matèria i energia del procés. El procediment seguit consisteix, primerament, a definir els components presents en el sistema i seleccionar el paquet termodinàmic més adequat. Posteriorment, s'introdueixen els corrents d'entrada i es configura la columna d'absorció fins a obtenir una simulació convergent.

Abans de començar la simulació de la columna, s'han definit tots els components del procés dins l'apartat Properties, concretament a Component Lists. En aquest cas, els components introduïts són monòxid de carboni (CO), nitrogen (N_2), oxigen (O_2), metanol, formaldehid i aigua. El component que es vol absorbir principalment és el formaldehid, mentre que l'aigua actua com a dissolvent dins la columna d'absorció.

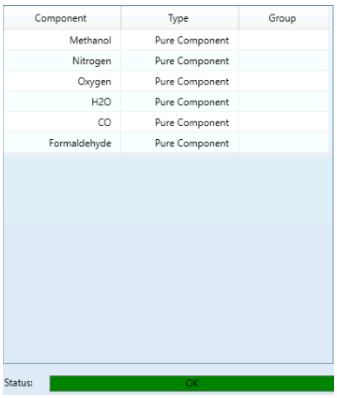


Figura 11.6. Llista de components definida a Aspen HYSYS.

A continuació, s'ha seleccionat el paquet termodinàmic emprat per al càlcul de les propietats físiques, l'equilibri de fases i les condicions dels corrents. En aquest cas, s'ha escollit el paquet NRTL amb Peng-Robinson (NRTL-PR), ja que permet representar adequadament sistemes amb components polars i no ideals, com és el cas de les mescles que contenen aigua, metanol i formaldehid, combinades amb gasos no condensables com CO, N_2 i O_2. Aquest paquet s'ha definit dins l'apartat Fluid Packages de la pestanya Properties.

Fluid Package	Component List	Property Package	Status
Basis-1	Component List - 1 [HYSYS Datab	NRTL - PR	Input Complete

Figura 11.7. Selecció del paquet termodinàmic NRTL-PR a Aspen HYSYS.

Una vegada definides les propietats del sistema, s'ha accedit a l'apartat Simulation per introduir els corrents d'entrada a la columna d'absorció. La columna AC-301 presenta un corrent gasós d'entrada, format principalment pels gasos no condensables i els components a absorbir, i un corrent líquid d'entrada format per aigua. Ambdós corrents entren en contacte a contracorrent dins de la columna: el corrent gasós s'introdueix per la part inferior, mentre que el corrent d'aigua entra per la part superior. D'aquesta manera s'afavoreix el contacte entre fases i la transferència de formaldehid cap a la fase líquida.

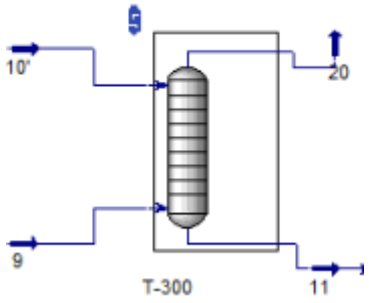


Figura 11.8. Representació de la columna d'absorció AC-301 en el Flowsheet Case.

Les condicions d'entrada dels corrents s'han especificat a partir dels resultats obtinguts en el reactor. En cada corrent s'han definit la temperatura, la pressió, el cabal i la composició corresponent. Aquestes dades són necessàries perquè Aspen HYSYS pugui calcular l'equilibri entre fases i determinar l'eficiència de l'absorció assolida a la columna.

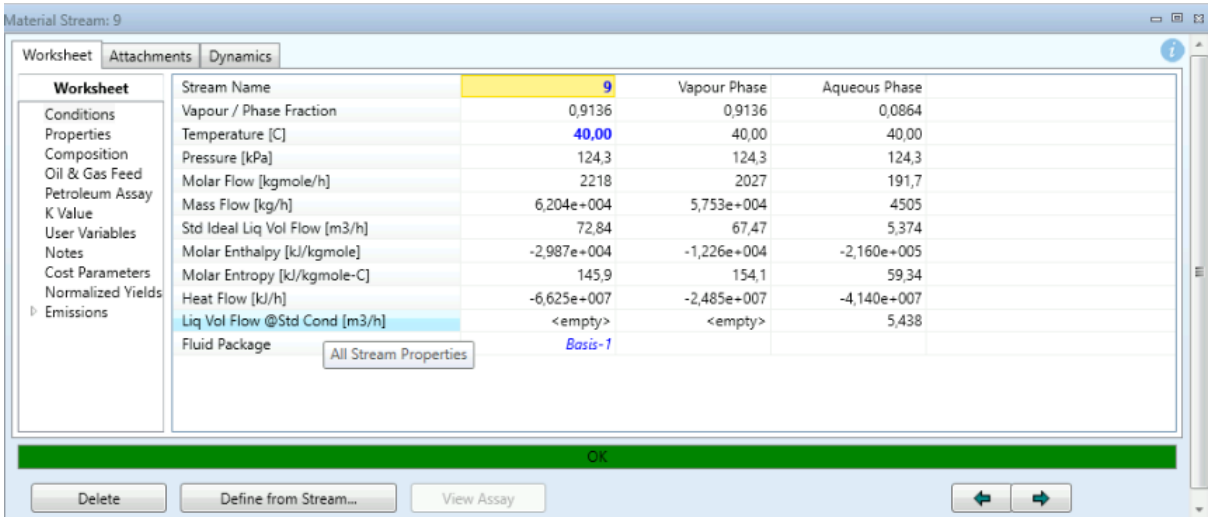


Figura 11.9. Condicions del corrent gasós d'entrada a la AC-301.

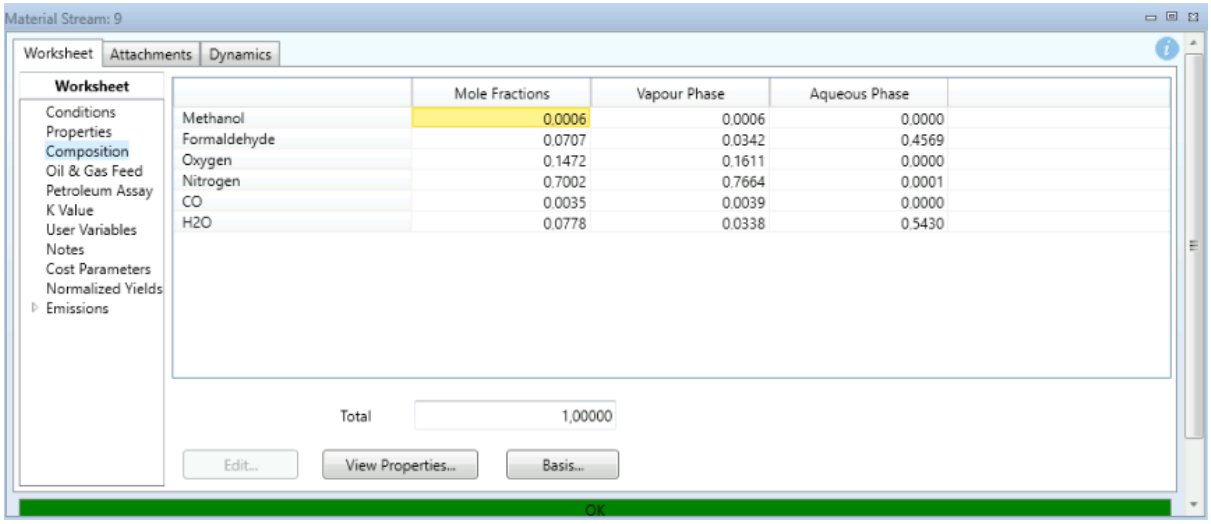


Figura 11.10. Composició del corrent gasós d'entrada a la AC-301.

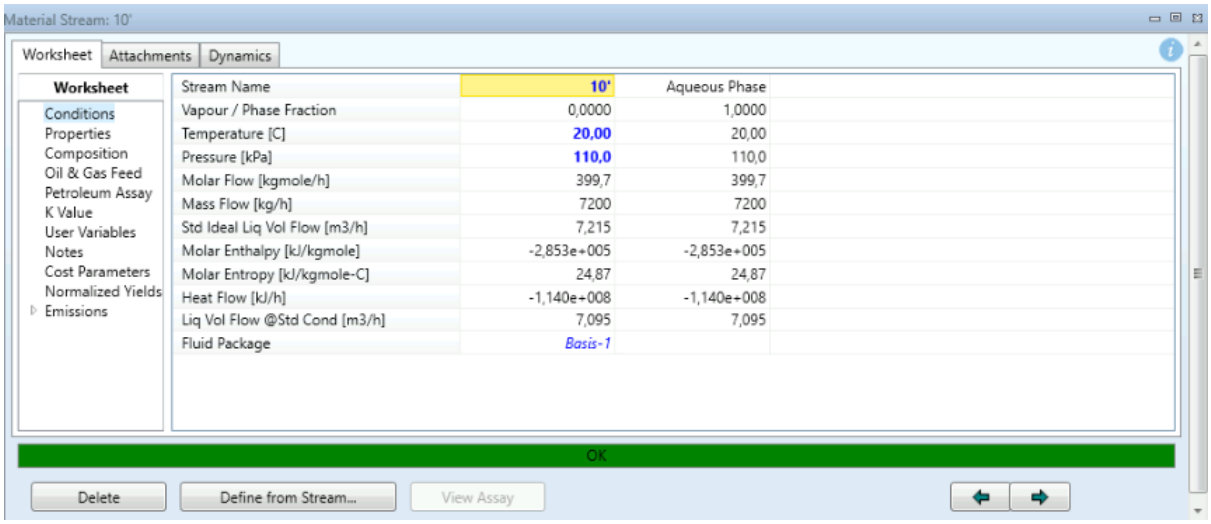


Figura 11.11. Condicions del corrent d'aigua d'entrada a la AC-301.

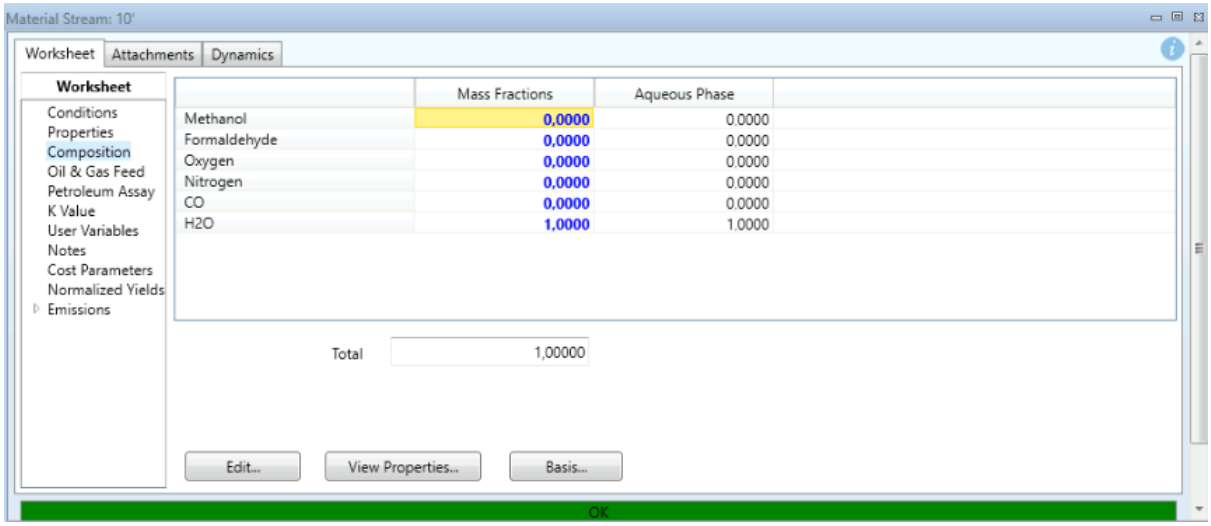


Figura 11.12. Composició del corrent d'aigua d'entrada a la AC-301.

Un cop definits els corrents d'entrada, s'ha configurat la columna d'absorció indicant el nombre d'etapes, les etapes d'entrada dels corrents, les pressions de treball i les especificacions necessàries per assolir la separació desitjada. En aquest cas, el disseny s'ha orientat a maximitzar l'absorció de formaldehid en el corrent líquid de sortida.

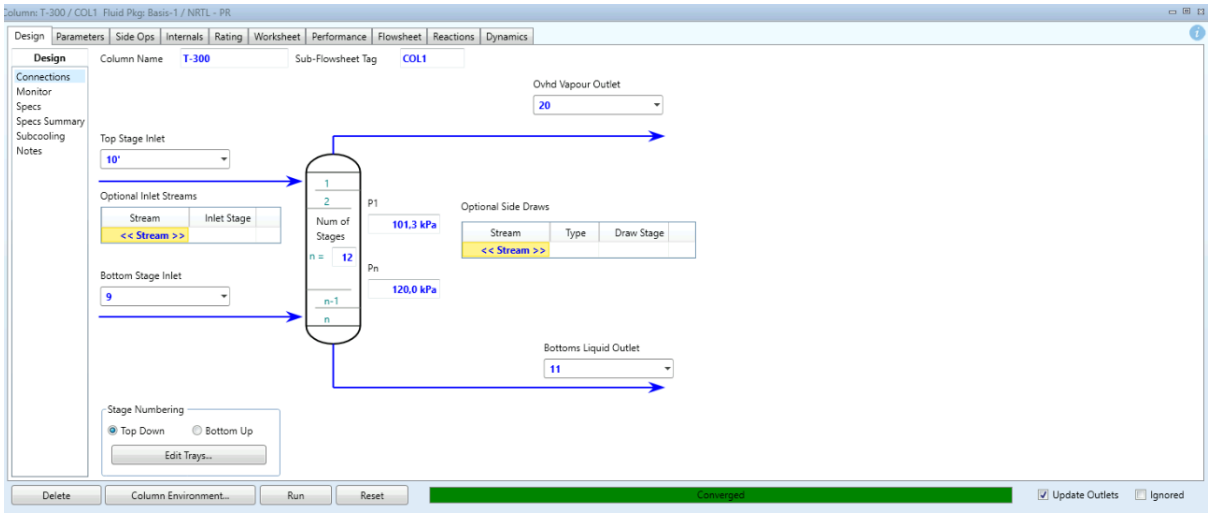


Figura 11.13. Apartat Connections de la columna d'absorció AC-301.

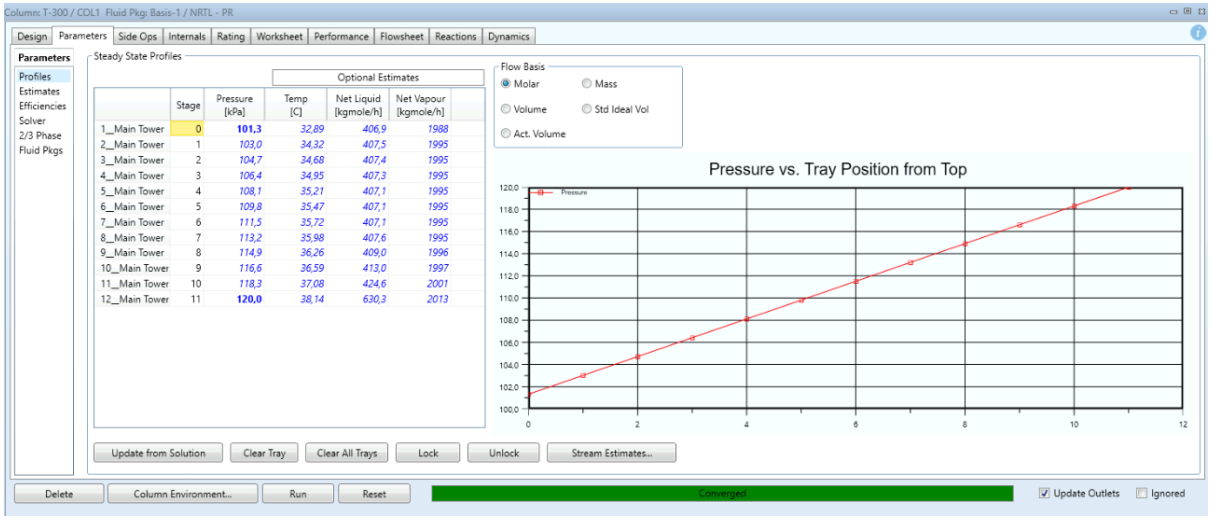


Figura 11.14. Apartat Parameters de la columna d'absorció AC-301.

Posteriorment, s'ha executat la simulació mitjançant el botó Run. La columna es considera correctament simulada quan Aspen HYSYS aconsegueix la convergència i tots els corrents apareixen especificats correctament. En cas contrari, cal revisar les

especificacions introduïdes, el nombre d'etapes, les pressions o les condicions dels corrents d'entrada.

Quan la simulació convergeix, es poden consultar els resultats principals de la columna, com ara les temperatures i pressions al llarg de les etapes, els cabals dels corrents de sortida i les composicions finals. Aquests resultats permeten comprovar l'eficàcia de l'absorció i verificar que el formaldehid s'ha transferit majoritàriament cap al corrent líquid.

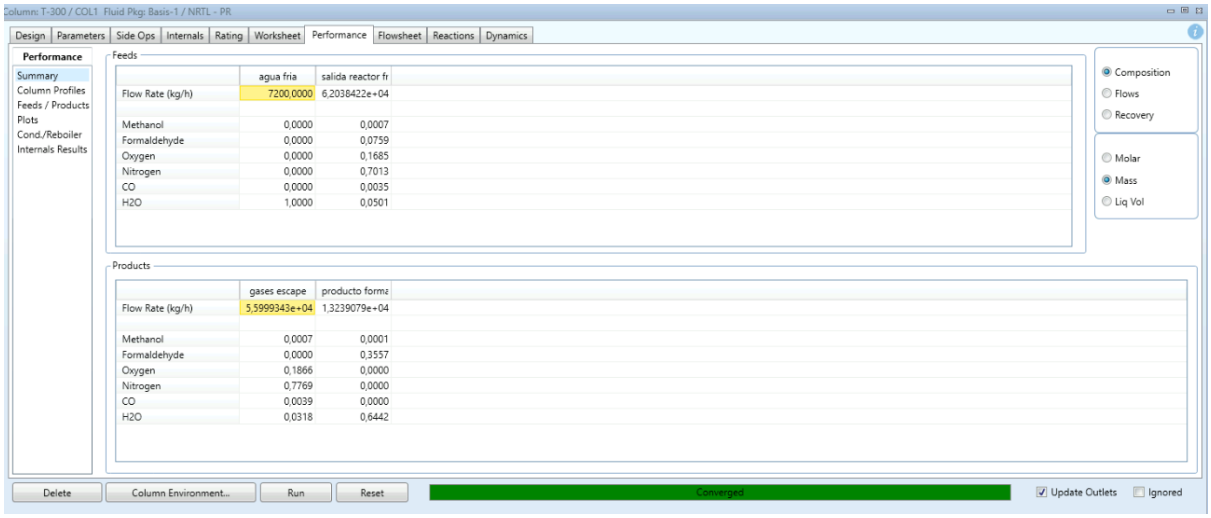


Figura 11.15. Resultats de la columna d'absorció AC-301.

Una vegada obtinguda la convergència de la columna, s'ha procedit a definir les característiques internes de la AC-301 a l'apartat Internals d'Aspen HYSYS. Aquest apartat permet especificar el tipus de contacte entre fases, les dimensions internes de la columna i els paràmetres hidràulics necessaris per comprovar que el disseny és adequat.

Per accedir-hi, cal seleccionar la columna d'absorció i anar a la pestanya Internals. Posteriorment, s'ha d'afegir una nova secció interna mitjançant l'opció Add New i visualitzar-ne els paràmetres amb l'opció View. En aquest apartat es poden introduir o modificar dades com el tipus d'intern utilitzat, el nombre d'etapes, la separació entre plats o l'alçada de rebliment, segons el tipus de columna definida.

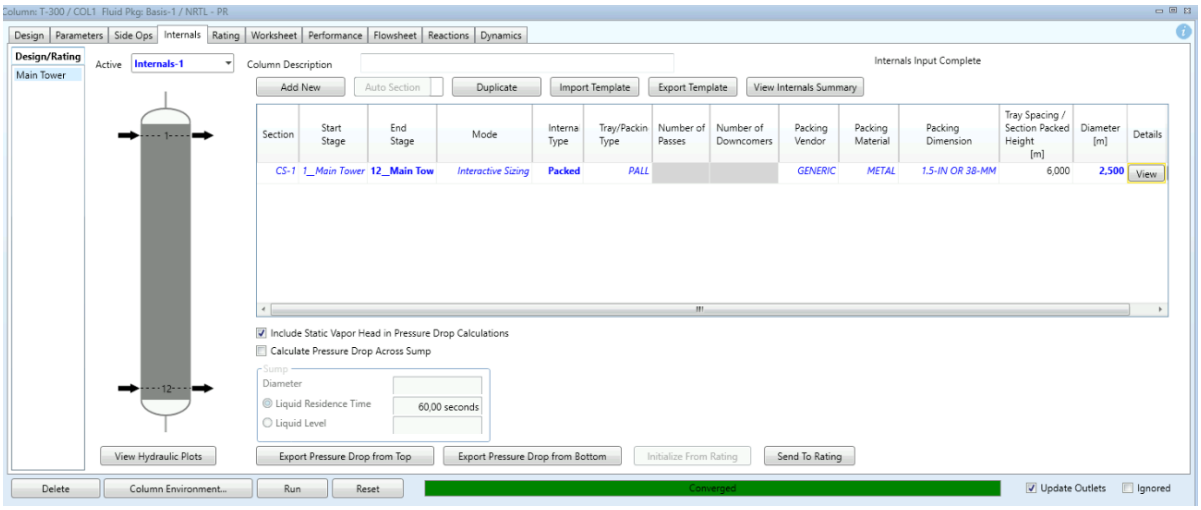


Figura 11.16. Apartat Internals de la columna d'absorció AC-301.

A l'apartat Geometry dels Internals, s'ha definit una secció empaquetada activa des de l'etapa 1 fins a l'etapa 12. El tipus de rebliment seleccionat ha estat Pall Rings, amb un proveïdor genèric i material metàl·lic. Per al disseny final s'ha considerat que aquest material correspon a acer inoxidable 316L, ja que presenta una bona resistència mecànica i una compatibilitat adequada amb el sistema format per aigua, metanol i formaldehid.

Pel que fa a la mida del rebliment, s'han seleccionat anells Pall de 1,5 in / 38 mm, amb un factor de rebliment de 92,00 m^2/m^3. Aquesta mida proporciona una bona relació entre superfície específica disponible per a la transferència de matèria i pèrdua de càrrega, motiu pel qual es considera adequada per a aquesta operació d'absorció.

El diàmetre mínim calculat inicialment per Aspen HYSYS va ser de 2,437 m. Tot i això, per al disseny final s'ha adoptat un diàmetre intern de 2,5 m, amb l'objectiu d'augmentar el marge de seguretat hidràulic, reduir la pèrdua de càrrega i disminuir el risc d'inundació de la columna. Un cop introduït aquest valor, el programa valida el disseny de la secció empaquetada.

L'alçada total de rebliment considerada és de 6 m. Aquesta alçada s'obté a partir de les 12 etapes definides a la columna i d'una alçada de rebliment de 0,5 m per etapa. D'aquesta manera, l'alçada empaquetada total es calcula segons:

$$12 \cdot 0{,}5 = 6\,m$$

Per tal d'assegurar una bona distribució del líquid al llarg de tota la columna, aquesta alçada total de rebliment es considera dividida en dues seccions de 3 m cadascuna, separades per un redistribuïdor de líquid. Així s'eviten problemes de mala distribució del dissolvent i es manté l'alçada necessària per assolir l'absorció requerida.

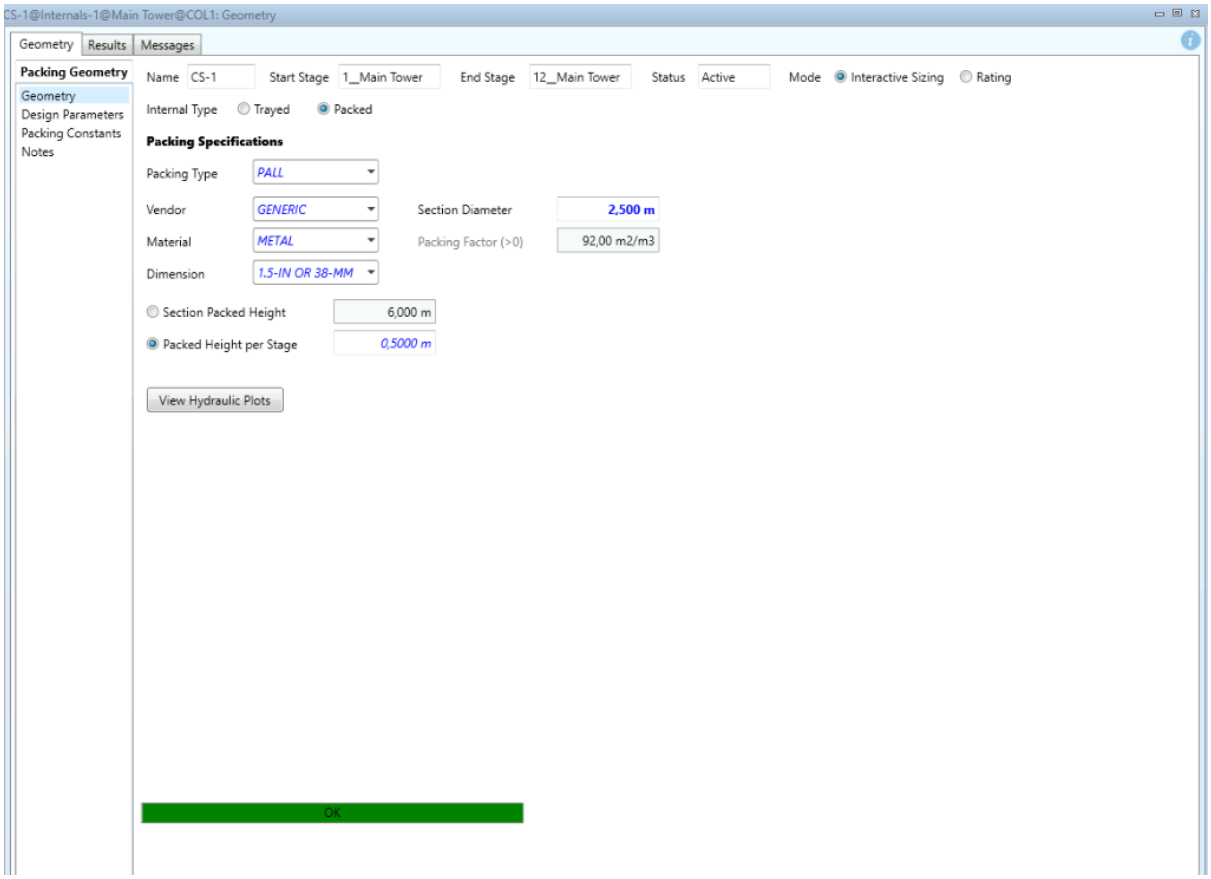


Figura 11.17. Apartat Geometry dels Internals de la AC-301.

Finalment, un cop definits correctament els interns, s'han consultat els resultats principals a l'apartat Internals Results, dins la pestanya Performance. En aquest apartat es poden obtenir les dimensions principals de la columna, com ara l'alçada, el diàmetre, la pèrdua de càrrega i altres paràmetres hidràulics d'interès. Aquestes dades s'utilitzaran posteriorment per al dimensionament mecànic de la columna i per a l'aplicació del codi ASME.

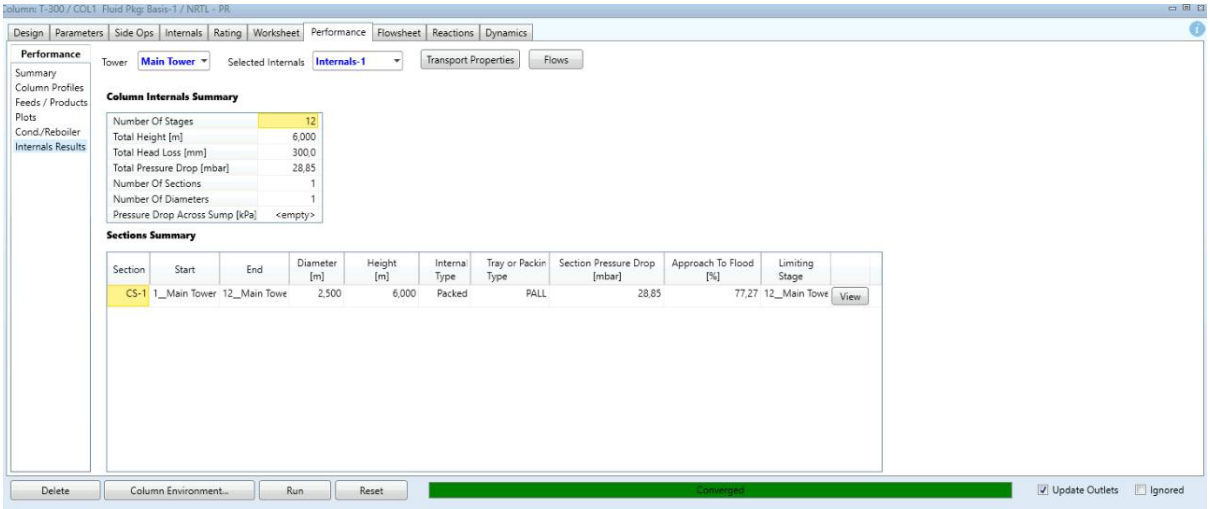


Figura 11.18. Resultats dels Internals de la columna d'absorció AC-301.

11.10. Disseny de la columna de destil·lació

En el procés es disposa d'una columna de destil·lació, la qual té com a objectiu separar els diferents components presents en el corrent procedent de l'etapa anterior del procés. Aquesta columna permet obtenir el corrent enriquit en el component d'interès i assolir les especificacions requerides per al producte.

Per al disseny de la columna de destil·lació s'ha utilitzat el programa Aspen HYSYS, a partir de les condicions d'operació obtingudes en els balanços de matèria i energia. Primerament, s'ha dut a terme una simulació preliminar mitjançant una columna Short-Cut, amb l'objectiu d'obtenir una estimació inicial del nombre mínim d'etapes, la relació de reflux mínima, el nombre d'etapes teòriques i l'etapa òptima d'alimentació. Posteriorment, aquests valors s'han utilitzat com a punt de partida per al disseny rigorós de cadascuna de les columnes.

Abans de començar la simulació, s'han definit els components presents en el sistema dins l'apartat Properties, concretament a Component Lists. A continuació, s'ha seleccionat el paquet termodinàmic NRTL amb Peng-Robinson (NRTL-PR), el qual permet representar adequadament sistemes no ideals amb components polars, com el metanol, el formaldehid i l'aigua, juntament amb altres components lleugers presents en el procés.

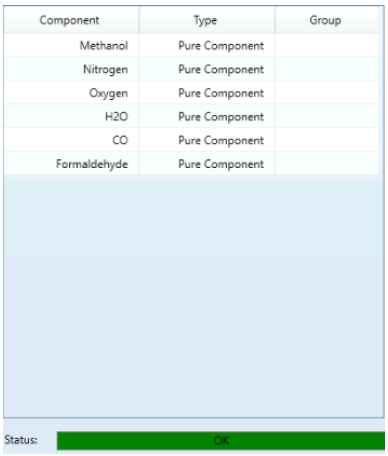


Figura 11.19. Llista de components definida a Aspen HYSYS.

Fluid Package	Component List	Property Package	Status
Basis-1	Component List - 1 [HYSYS Datab	NRTL - PR	Input Complete

Figura 11.20. Selecció del paquet termodinàmic NRTL-PR a Aspen HYSYS.

11.10.1. Simulació Short-Cut

Primerament, s'ha realitzat una simulació preliminar de la columna de destil·lació mitjançant l'eina Short-Cut Distillation d'Aspen HYSYS. Aquesta simulació permet obtenir una primera aproximació del disseny de la columna abans de dur a terme el càlcul rigorós, reduint així el temps de disseny i facilitant la selecció dels paràmetres inicials.

En la columna Short-Cut s'ha connectat el mateix corrent d'alimentació que posteriorment s'introduirà a la columna de destil·lació rigorosa, de manera que les condicions de temperatura, pressió, cabal i composició coincideixen amb les del procés real simulat.

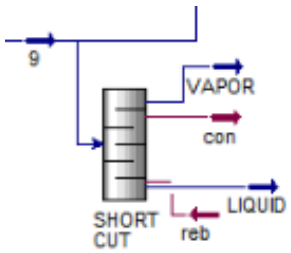


Figura 11.21. Representació de la columna Short-Cut en el Flowsheet Case.

Per configurar la columna Short-Cut, cal definir els components clau de la separació. Concretament, s'ha d'indicar quin component actua com a Light Key (LK) i quin component actua com a Heavy Key (HK). A més, cal especificar la fracció del component pesat que es permet obtenir pel destil·lat i la fracció del component lleuger que es permet obtenir pel corrent de fons. També s'han introduït les pressions del condensador i del reboiler, així com una relació de reflux externa superior a la relació de reflux mínima calculada pel programa.

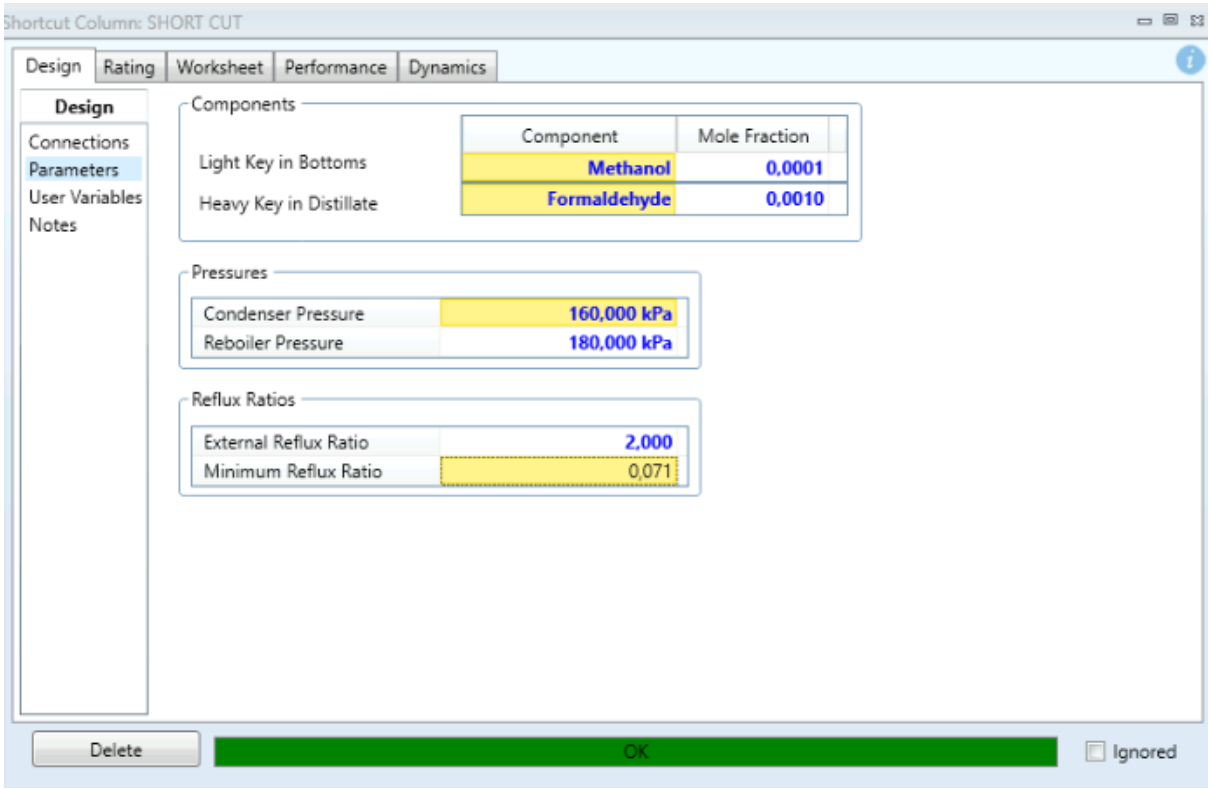


Figura 11.22. Apartat Parameters de la columna Short-Cut.

A partir d'aquestes dades, Aspen HYSYS calcula el nombre mínim d'etapes, el nombre d'etapes teòriques requerides, l'etapa òptima d'alimentació, la temperatura del condensador, la temperatura del reboiler i la relació de reflux mínima. Aquests resultats s'utilitzen com a valors inicials per a la simulació rigorosa de la columna.

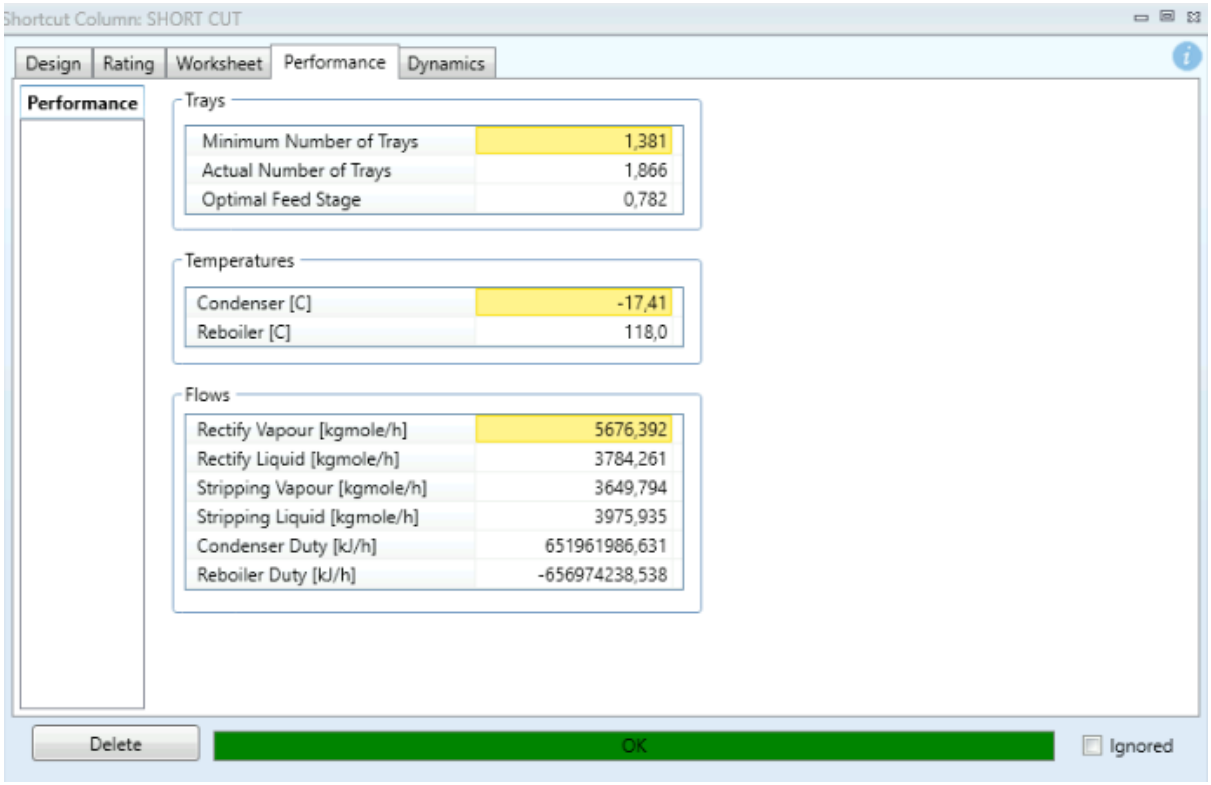


Figura 11.23. Apartat Performance de la columna Short-Cut.

Cal tenir en compte que la simulació Short-Cut considera etapes ideals, és a dir, amb una eficiència del 100%. Per aquest motiu, els resultats obtinguts només es fan servir com a primera estimació. En la simulació rigorosa posterior es podran ajustar el nombre d'etapes, les eficiències i les condicions d'operació per obtenir un disseny més realista.

11.10.2. Disseny rigorós de les columnes de destil·lació

Una vegada obtinguts els resultats preliminars de la simulació Short-Cut, s'ha introduït una columna de destil·lació rigorosa a Aspen HYSYS. Aquesta columna permet dur a terme un càlcul més detallat de l'equilibri de fases, els perfils de temperatura i pressió, els cabals interns i les composicions dels corrents de sortida.

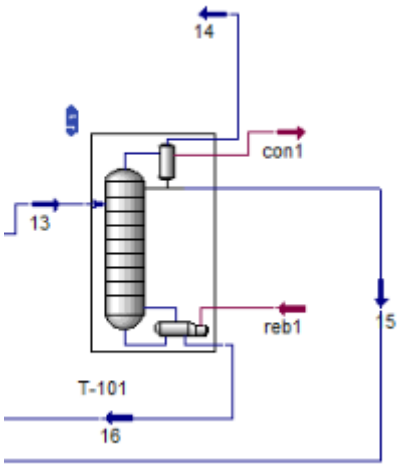


Figura 11.24. Representació de la columna de destil·lació rigorosa en el Flowsheet Case.

Concretament, s'ha introduït el nombre d'etapes, l'etapa d'alimentació, les pressions del condensador i del reboiler, la relació de reflux i les temperatures estimades del condensador i del reboiler. Aquests paràmetres permeten facilitar la convergència inicial de la columna.

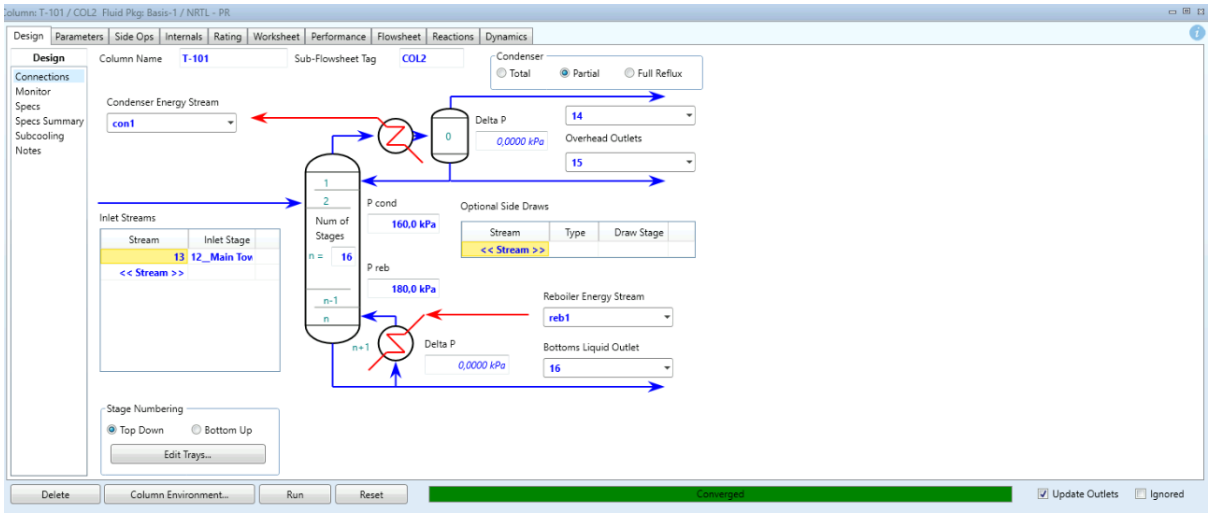


Figura 11.25. Apartat Connections de la columna de destil·lació.

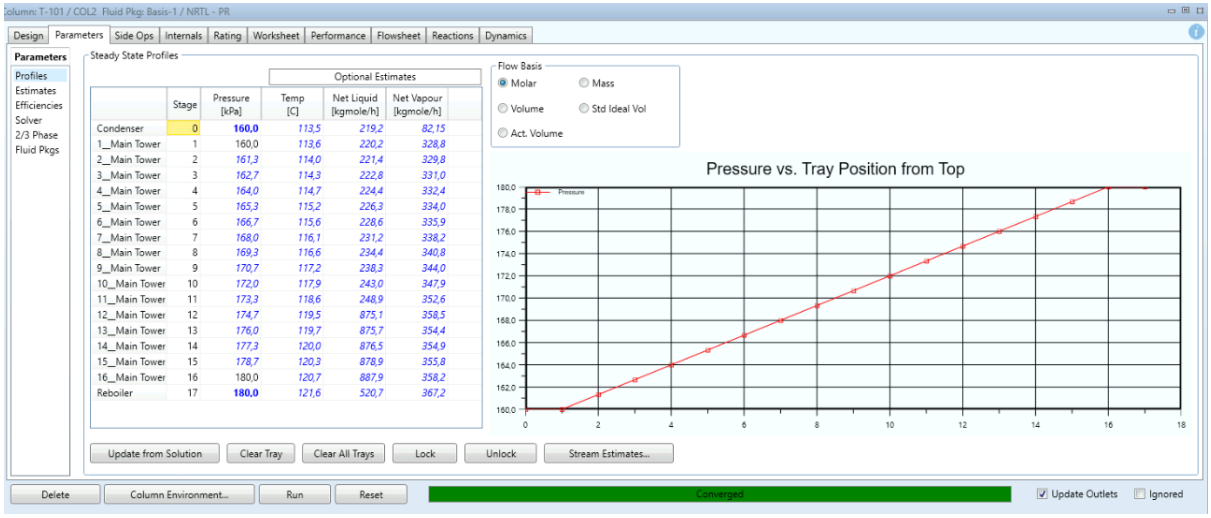


Figura 11.26. Apartat Parameters de la columna de destil·lació.

Posteriorment, s'han definit les especificacions necessàries perquè la columna pugui convergir. Habitualment, s'han utilitzat especificacions relacionades amb la relació de reflux, el cabal de destil·lat, el cabal de fons o la recuperació d'un component determinat en un dels corrents de sortida. Aquestes especificacions s'han ajustat segons l'objectiu de separació de cada columna.

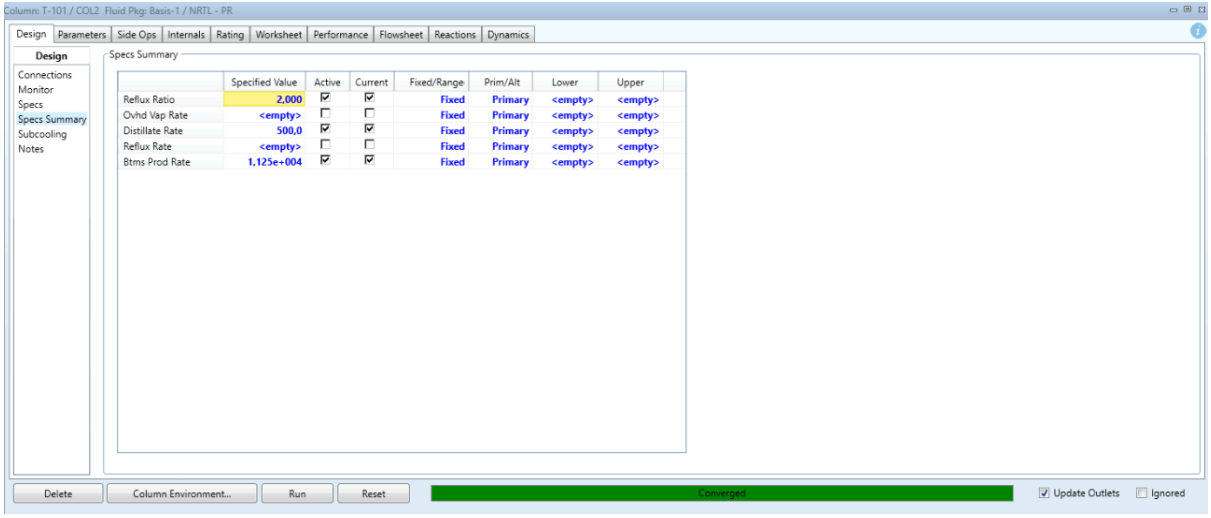


Figura 11.27. Apartat Specs Summary de la columna de destil·lació.

Una vegada definides les especificacions, s'ha executat la simulació mitjançant el botó Run. La columna es considera correctament simulada quan el programa aconsegueix la convergència i tots els corrents apareixen especificats. Per comprovar-ho, s'ha verificat l'estat visual dels corrents i de la icona de la columna dins del Flowsheet Case. Quan la

simulació és correcta, els corrents i la icona de l'equip apareixen en color blau fosc. En canvi, si algun corrent apareix en blau clar o la icona de la columna apareix en gris o vermell, cal revisar les especificacions introduïdes, les condicions d'entrada o els paràmetres de la columna fins a obtenir una simulació correcta.

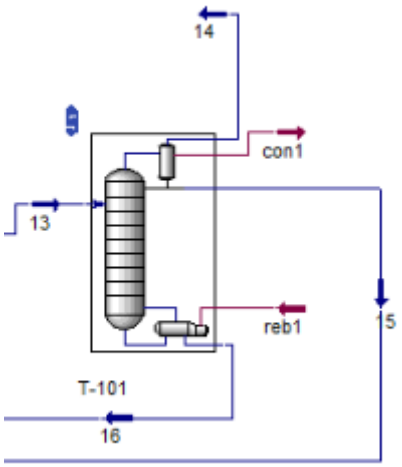


Figura 11.28. Columna de destil·lació convergida en Aspen HYSYS.

11.10.3. Disseny dels Internals

Una vegada aconseguida la convergència de la columna, s'ha procedit a definir les característiques internes de cadascuna de les columnes de destil·lació a l'apartat Internals d'Aspen HYSYS. Aquest apartat permet especificar el tipus d'intern utilitzat, el nombre d'etapes, la separació entre plats o el tipus de rebliment, així com el diàmetre i l'alçada de la columna.

En el cas de les columnes de destil·lació, s'ha seleccionat el tipus d'intern més adequat en funció de les característiques de cada separació. Per a columnes amb plats, s'han definit paràmetres com el tipus de plat, l'espaiat entre plats, el diàmetre de columna i els criteris hidràulics. En cas d'utilitzar rebliment, s'han definit el tipus de rebliment, la mida, el material, el factor de rebliment i l'alçada empaquetada.

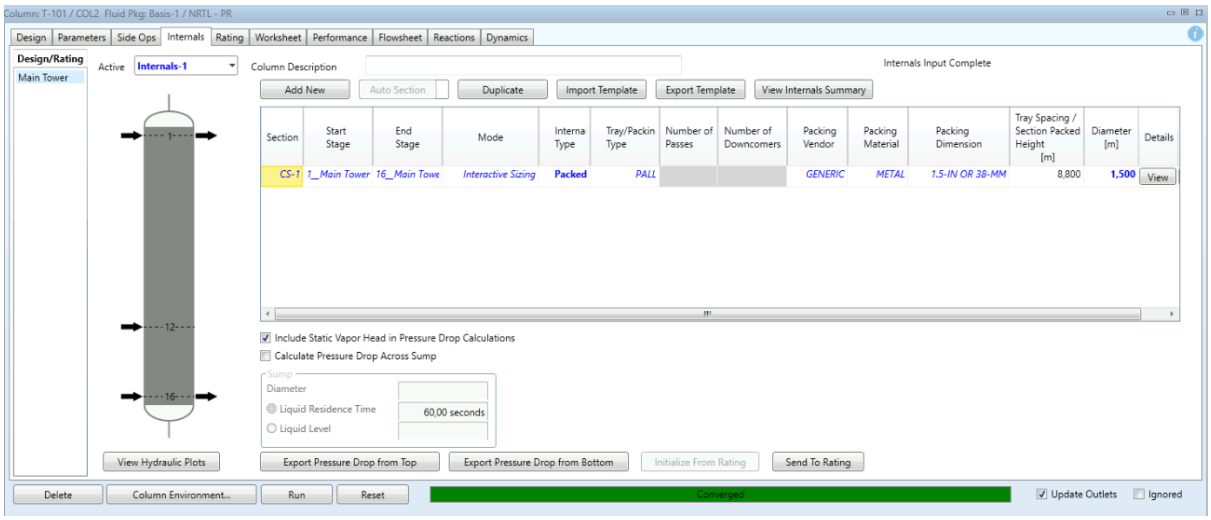


Figura 11.29. *Apartat Internals de la columna de destil·lació.*

A l'apartat Geometry dels Internals es poden consultar i modificar les dimensions principals de la columna. Aquestes dimensions inclouen el diàmetre intern, l'alçada de la secció, el nombre d'etapes considerades i altres paràmetres geomètrics necessaris per al dimensionament.

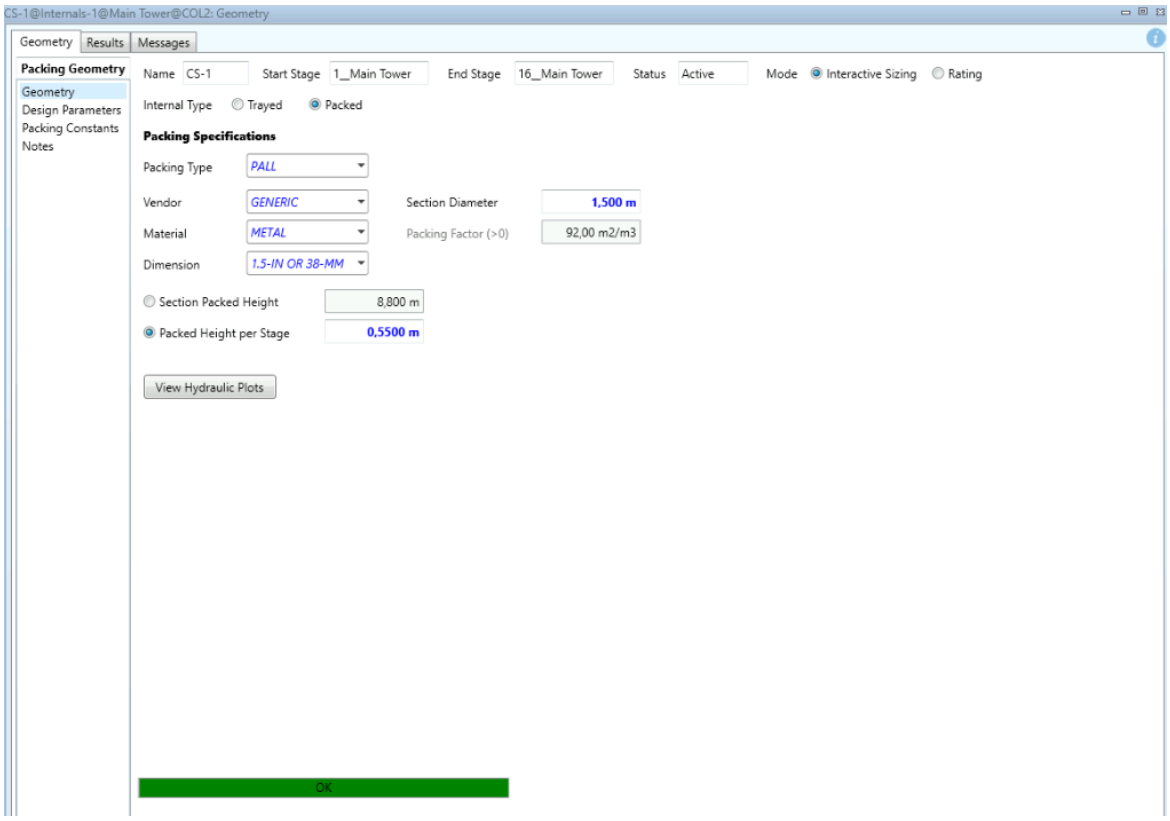


Figura 11.30. *Apartat Geometry dels Internals de la columna de destil·lació.*

Finalment, els resultats principals del disseny intern s'han consultat a l'apartat Internals Results, dins la pestanya Performance. En aquest apartat s'obtenen dades com el diàmetre de columna, l'alçada, la pèrdua de càrrega, el percentatge d'inundació i altres paràmetres hidràulics d'interès. Aquestes dades s'utilitzen posteriorment per al càlcul mecànic de la columna i per a l'aplicació del codi ASME.

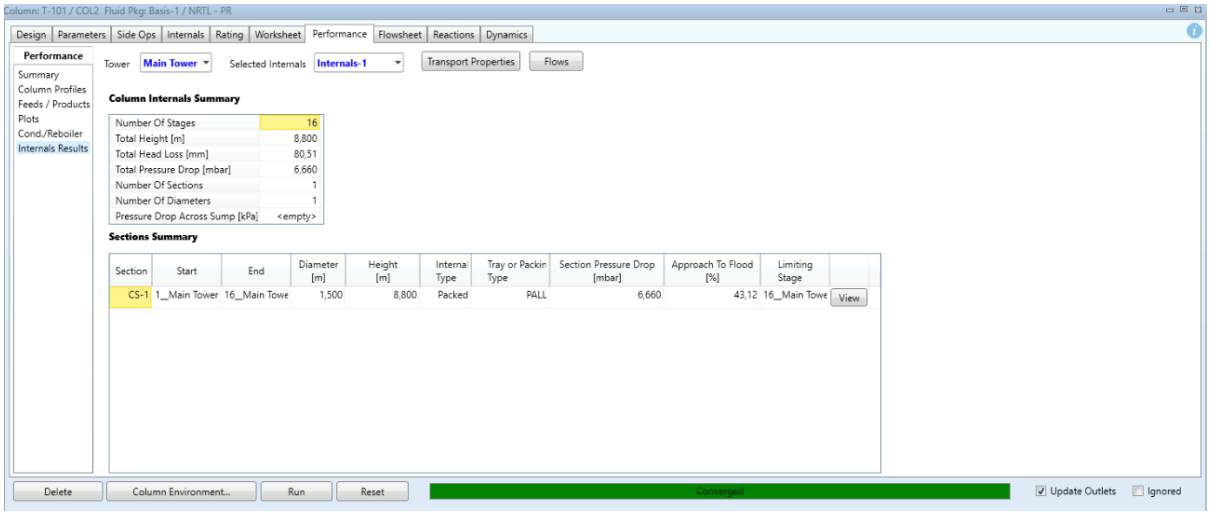


Figura 11.31. Resultats dels Internals de la columna de destil·lació.

11.10.4. Aplicació del codi ASME al disseny de les columnes

Una vegada s'ha realitzat la simulació de les columnes mitjançant Aspen HYSYS i s'han obtingut les principals dades de disseny, es procedeix a aplicar el codi ASME Secció VIII, Divisió 1[2], corresponent al disseny de recipients a pressió. Aquesta normativa permet determinar els paràmetres mecànics principals de les columnes, com ara la pressió i temperatura de disseny, el gruix de la virolla, el gruix dels capçals, l'alçada total, el volum i el pes de l'equip.

Les columnes de destil·lació i absorció es consideren recipients cilíndrics verticals sotmesos a pressió interna. Per aquest motiu, el seu disseny mecànic s'ha dut a terme aplicant les equacions corresponents a carcasses cilíndriques i capçals segons el codi ASME.

En aquest apartat es presenta el procediment de càlcul seguit per a una de les columnes i, posteriorment, es recullen els resultats obtinguts per a les dues columnes en taules resum.

11.10.4.1. Determinació de la pressió i temperatura de disseny

En primer lloc, cal determinar la pressió de disseny de cada columna. Aquesta es calcula a partir de la pressió d'operació més elevada de la columna, que normalment correspon a la pressió del reboiler o de la part inferior de la columna. S'utilitza el valor més desfavorable per assegurar que l'equip queda dimensionat de manera segura.

La pressió de disseny es calcula mitjançant l'equació següent:

$$Pd = Pop \cdot (1 + A/100) + B$$

On:

Pd és *la pressió de disseny*.

Pop és *la pressió d'operació*.

A *i* B *són paràmetres definits segons el rang de pressió d'operació*.

De manera anàloga, la temperatura de disseny es determina a partir de la temperatura d'operació més elevada de la columna. Aquesta sol trobar-se també a la zona inferior, ja que el reboiler treballa a la temperatura més alta del sistema.

La temperatura de disseny es calcula mitjançant:

$$Td = Top \cdot \left(1 + \frac{A}{100}\right) + B$$

En primer lloc, s'han determinat les pressions i temperatures de disseny de totes les torres. Per al càlcul de la pressió de disseny s'ha considerat la pressió d'operació màxima de cada columna, corresponent a la condició més desfavorable. Aquest valor s'ha convertit a psia i s'ha aplicat l'Equació corresponent per a la determinació de la pressió de disseny.

En el cas de la columna AC-301, la pressió màxima d'operació és de 120 kPa, equivalent a 17,4 psia. Aquest valor es troba dins del rang comprès entre 15 i 50 psia, per al qual els valors dels paràmetres són A = -100 i B = 50.

En el cas de la columna AC-301, la pressió màxima d'operació és de 180 kPa, equivalent a 26,1 psia. Aquest valor també es troba dins del mateix rang.

Pel que fa a la temperatura de disseny, s'ha considerat la temperatura d'operació màxima de cada torre. Aquesta s'ha convertit a °F, s'ha aplicat l'equació corresponent i posteriorment s'ha tornat a expressar en °C.

A la Taula 11.59 es recullen les pressions i temperatures de disseny calculades per a cadascuna de les columnes.

Taula 11.59. Pressions i temperatures de disseny de les columnes.

Columna	Tipus	Pressió d'operació màxima (kPa)	Pressió de disseny (kPa)	Temperatura d'operació màxima (°C)	Temperatura de disseny (°C)
AC-301	Absorció	120	344,7	40	121,1
DC-301	Destil·lació	180	344,7	120	147,8

11.10.4.2. Càlcul del gruix de la virolla

Una vegada determinades les pressions i temperatures de disseny de les torres, es procedeix al càlcul del gruix mínim requerit per a la part cilíndrica, també anomenada virolla. Com que totes les torres treballen com a recipients cilíndrics sotmesos a pressió interna, s'aplica l'equació del codi ASME corresponent a carcasses cilíndriques.

Per a aquest càlcul s'utilitza la següent equació:

$$t = \frac{(P \cdot R)}{(S \cdot E - 0.6 \cdot P)}$$

On:

t *és el gruix mínim requerit de la virolla, en mm.*

P *és la pressió de disseny, en Pa.*

R *és el radi intern de la torre, en mm.*

S *és l'esforç admissible del material, en Pa.*

E *és l'eficiència de soldadura.*

Per aplicar aquesta equació s'ha considerat que les torres AC-301 i DC-301 presenten un diàmetre intern de 2,500 m i 1,5 m, respectivament.

El material seleccionat per a la construcció de les torres és acer inoxidable 316L, ja que presenta una bona resistència mecànica i una compatibilitat adequada amb els components presents en el procés, com l'aigua, el metanol i el formaldehid. Per al càlcul s'ha adoptat un valor conservador de l'esforç admissible de S = $1{,}03 \cdot 10^8$ Pa, corresponent a una temperatura superior a la temperatura màxima de disseny de les torres. D'aquesta manera, es garanteix que el valor utilitzat és segur per a totes les condicions considerades.

Pel que fa a l'eficiència de soldadura, s'ha considerat un valor de E = 1, corresponent a una soldadura totalment radiografiada. La pressió de disseny utilitzada per a totes les torres és de 344,7 kPa, equivalent a 344700 Pa, tal com s'ha calculat anteriorment.

Taula 11.60. Gruixos de la virolla de les torres.

Columna	Diàmetre intern (m)	Radi intern (mm)	Pressió de disseny (Pa)	S (Pa)	E	Gruix calculat (mm)	Gruix adoptat (mm)
AC-301	2,500	1250	344700	$1{,}03 \cdot 10^8$	1	4,19	6
DC-301	1,500	750	344700	$1{,}03 \cdot 10^8$	1	2,51	6

Tot i que els gruixos mínims calculats són inferiors al gruix comercial adoptat, s'ha seleccionat un gruix final de 6 mm per a ambdues columnes. Aquest valor permet incorporar un marge de seguretat, facilitar la fabricació i considerar possibles toleràncies mecàniques o efectes de corrosió durant la vida útil de l'equip.

11.10.4.3. Càlcul del gruix dels capçals

Una vegada calculat el gruix de la virolla, es procedeix al dimensionament dels capçals superior i inferior de cadascuna de les torres. Els capçals són les parts de tancament situades als extrems de la columna i, igual que la virolla, han de suportar la pressió interna de l'equip.

En aquest cas, s'ha decidit utilitzar capçals torisfèrics per a totes les torres, ja que són habituals en recipients verticals sotmesos a pressions moderades i presenten una bona

relació entre resistència mecànica, cost i facilitat de fabricació. A més, aquest tipus de capçal és adequat per a les condicions de pressió de disseny de les torres, que són de 344,7 kPa.

Per al càlcul del gruix mínim requerit dels capçals torisfèrics s'utilitza la següent equació:

$$t = \frac{(0.885 \cdot P \cdot L)}{(S \cdot E - 0.1 \cdot P)}$$

On:

t *és el gruix mínim requerit del capçal, en mm.*

P *és la pressió de disseny, en Pa.*

L *és el producte entre el diàmetre intern de la torre i una constant geomètrica.*

S *és l'esforç admissible del material, en Pa.*

E *és l'eficiència de soldadura.*

Per als capçals torisfèrics s'ha considerat una geometria tipus 80-10 Flanged & Dished. En aquest cas, el valor de L es calcula multiplicant el diàmetre intern de la torre per la constant K_1 = 0,99.

El material considerat és el mateix que per a la virolla, és a dir, acer inoxidable 316L, amb un esforç admissible de S = $1{,}03 \cdot 10^8$ Pa. També s'ha considerat una eficiència de soldadura de E = 1.

Per al disseny final s'ha adoptat un gruix comercial de 8 mm per als capçals, superior al valor mínim calculat. Aquest sobredimensionament permet incorporar un marge de seguretat, facilitar la fabricació i considerar possibles toleràncies mecàniques o efectes de corrosió.

Taula 11.61. Tipus i gruix dels capçals de les columnes.

Columna	Tipus de capçal	Gruix calculat (mm)	Gruix adoptat (mm)
AC-301	Torisfèric	7,33	8
DC-301	Torisfèric	4,40	8

11.10.4.4. Càlcul de l'alçada total de les columnes

Una vegada determinats els gruixos de la virolla i dels capçals, es procedeix al càlcul de l'alçada total de cadascuna de les columnes. Aquesta alçada es determina a partir de l'alçada de la part cilíndrica i de l'alçada dels dos capçals, un situat a la part superior i l'altre a la part inferior de la columna.

L'alçada de la part cilíndrica s'obté a partir del disseny realitzat a Aspen HYSYS, concretament dels resultats obtinguts a l'apartat Internals. En canvi, l'alçada dels capçals es calcula a partir de la geometria seleccionada. Com s'ha indicat anteriorment, les columnes disposen de capçals torisfèrics tipus 80-10 Flanged & Dished.

Per calcular l'alçada d'un capçal torisfèric, primer es determina el diàmetre exterior del capçal a partir del diàmetre intern de la columna i del gruix adoptat:

$$De = Di + 2 \cdot t$$

On:

De *és el diàmetre exterior del capçal.*

Di *és el diàmetre intern de la columna.*

t *és el gruix adoptat del capçal.*

Per a la columna AC-301, amb un diàmetre intern de 2500 mm i un gruix adoptat dels capçals de 8 mm:

$$De = 2500 + 2 \cdot 8 = 2516\,mm$$

A continuació, es calcula el radi esfèric interior i el radi rebordejat interior del capçal:

$$R = 0{,}8 \cdot De$$

$$r = 0{,}1 \cdot De$$

Substituint:

$$R = 0{,}8 \cdot 2516 = 2012{,}8\,mm$$

$$r = 0{,}1 \cdot 2516 = 251{,}6\,mm$$

Finalment, l'alçada del capçal es calcula mitjançant l'equació geomètrica corresponent als capçals torisfèrics:

$$h = R - \sqrt{[(R - r)^2 - (Di/2 - r)^2]}$$

Substituint els valors:

$$h = 2012{,}8 - \sqrt{[(2012{,}8 - 251{,}6)^2 - (2500/2 - 251{,}6)^2]}$$

$$h = 561{,}9\,mm = 0{,}562\,m$$

Per tant, per a la columna AC-301, l'alçada d'un capçal és de 0,562 m.

En el cas de la columna DC-301, amb un diàmetre intern de 1500 mm i un gruix adoptat dels capçals de 8 mm:

$$De = 1500 + 2 \cdot 8 = 1516\,mm$$

$$R = 0{,}8 \cdot 1516 = 1212{,}8\,mm$$

$$r = 0{,}1 \cdot 1516 = 151{,}6\,mm$$

Aplicant la mateixa equació:

$$h = 1212{,}8 - \sqrt{[(1212{,}8 - 151{,}6)^2 - (1500/2 - 151{,}6)^2]}$$

$$h = 336{,}4\,mm = 0{,}336\,m$$

Per tant, per a la columna DC-301, l'alçada d'un capçal és de 0,336 m.

Finalment, l'alçada total de cada columna es calcula mitjançant:

$$htotal = hcilindre + 2 \cdot hcapçal$$

On:

htotal és l'alçada total de la columna.

hcilindre és l'alçada de la part cilíndrica.

hcapçal és l'alçada d'un capçal.

A la Taula 11.62es recullen les alçades de la part cilíndrica, l'alçada dels capçals i l'alçada total de cadascuna de les columnes.

Taula 11.62. Dimensions principals de les columnes.

Columna	Alçada part cilíndrica (m)	Alçada d'un capçal (m)	Alçada total (m)
AC-301	6,0	0,562	7,12
DC-301	8,8	0,336	9,47

11.10.4.5. Càlcul del pes de les columnes

Finalment, es determina el pes de cadascuna de les columnes en diferents situacions: columna buida, columna plena d'aigua i columna en operació. Aquests valors són importants per al disseny estructural, ja que permeten conèixer les càrregues que haurà de suportar la fonamentació de cada equip.

Per calcular el pes de la columna buida, es considera el volum de material corresponent a la virolla i als capçals, així com la densitat del material de construcció. En aquest cas, totes les columnes s'han considerat construïdes en acer inoxidable 316L, amb una densitat aproximada de 8000 kg/m^3.

El pes de la columna buida es calcula mitjançant:

$$Mbuida = Vparet \cdot \rho material$$

On:

$Mbuida$ és la massa de la columna buida, en kg.

$Vparet$ és el volum total de material de la columna, en m^3.

$\rho material$ és la densitat del material de construcció, en kg/m^3.

El pes de la columna plena d'aigua es calcula afegint al pes buit la massa d'aigua continguda dins del volum intern de la columna. Per aquest càlcul s'utilitza una densitat de l'aigua de 1000 kg/m^3.

$$Mplena = Mbuida + Vintern \cdot \rho aigua$$

Finalment, el pes de la columna en operació es calcula substituint la densitat de l'aigua per la densitat mitjana de la mescla present a l'interior de cada columna:

$$Moperació = Mbuida + Vintern \cdot \rho mescla$$

On:

$Moperació$ és *la massa de la columna en operació, en* kg.

$\rho mescla$ és *la densitat mitjana del fluid contingut dins la columna, en* kg/m^3.

Per determinar la densitat mitjana de cada columna, s'ha considerat el rang de densitats obtingut a Aspen HYSYS al llarg de l'equip. A partir d'aquest rang, s'ha calculat una densitat mitjana representativa per a cada cas. Els valors emprats es mostren a la Taula 11.63.

Taula 11.63. Densitats mitjanes emprades per al càlcul del pes en operació.

Columna	Densitat mínima (kg/m^3)	Densitat màxima (kg/m^3)	Densitat mitjana adoptada (kg/m^3)
AC-301	877,4	1001,0	939,2
DC-301	766,8	926,6	846,7

Amb aquests valors, s'han calculat els pesos de les columnes. Els resultats obtinguts es recullen a la taula següent.

Taula 11.64. Pesos de les columnes.

Columna	Pes columna buida (Tn)	Pes columna plena d'aigua (Tn)	Pes columna en operació (Tn)
AC-301	2,83	35,90	33,89
DC-301	2,20	18,53	16,03

Així doncs, la columna amb un pes més elevat és la AC-301, principalment a causa del seu diàmetre intern més gran, de 2,500 m. En tots dos casos, el pes en operació és inferior al pes de la columna plena d'aigua, ja que les densitats mitjanes de les mescles presents a l'interior són inferiors a la densitat de l'aigua.

11.11. Disseny del tanc pulmó TP-301

Per al dimensionament del tanc pulmó s'ha partit del cabal volumètric del corrent condensat, de 4,53 m^3/h, així com de les condicions d'operació del procés, corresponents a una temperatura de 113,5 °C i una pressió de 1,6 bar. S'ha seleccionat un temps de residència de 5 minuts per garantir una adequada estabilització del nivell de líquid i facilitar la separació dels gasos residuals presents a la mescla.

El volum útil del tanc s'ha calculat a partir del cabal d'entrada i del temps de residència establert, aplicant posteriorment un factor de sobredimensionament del 15%. Una vegada determinat el volum necessari, s'han calculat les dimensions geomètriques del recipient assumint una configuració vertical i una relació alçada-diàmetre d'1,5, d'acord amb la metodologia adoptada per a la resta de tancs pulmó de la planta.

Finalment, s'ha realitzat el dimensionament mecànic del recipient mitjançant els criteris establerts pel codi ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Section VIII, Division 1 [34], determinant la pressió i temperatura de disseny, el material de construcció i les espessors mínims requerits per al cos cilíndric i els fons toriesfèrics.

$$V_{mescla} = Q \cdot t_r$$

$$V_{tanc} = V_{mescla} \cdot 1{,}15$$

On:

V_{mescla}: $Volum\ de\ la\ mescla\ (m^3)$

V_{tanc}: $Volum\ del\ tanc\ (m^3)$

Q: $Cabal\ volumètric\ de\ la\ mescla\ \left(\frac{m^3}{h}\right)$

t_r: $Temps\ de\ residència\ al\ tanc\ (h)$

$$V_{mescla} = 4{,}53 \cdot 0.0833 = 0{,}3775 m^3$$

$$V_{tanc} = 0.3775 \cdot 1{,}15 = 0.434 m^3$$

Tenint en compte la relació alçada diàmetre d'1,5 i l'equació del volum del tanc, es calculen el diàmetre (D) i l'alçada (H).

$$H = 1{,}5 \cdot D$$

$$V_{tanc} = \frac{\pi}{4} \cdot H \cdot D^2$$

Substituïnt:

$$D = 0.7169m$$

$$H = 1{,}075m$$

11.11.1. Pressió de disseny

Es calculen dues pressions de disseny per determinar en funció de quina s'ha de dimensionar el tanc (la més elevada), mitjançant les equacions següents:

$$P_1 = 1{,}1 \cdot P_o$$

$$P_2 = P_o + 196{,}13$$

On:

P_o: $Pressió\ màxima\ d'operació\ de\ la\ columna\ (kPa)$

P_1: $Pressió\ de\ disseny\ 1\ (kPa)$

P_2: $Pressió\ de\ disseny\ 2\ (kPa)$

La columna de destil·lació on s'incorpora el tanc pulmó, té una pressió màxima d'operació de 180 kPa, per tant:

$$P_1 = 1{,}1 \cdot 180 = 198\ kPa$$

$$P_2 = 180 + 196{,}13 = 376{,}13kPa$$

El tanc es dissenyarà per una pressió màxima de 376,13kPa.

11.11.2. Temperatura de disseny

Es calculen dues temperatures de disseny per determinar en funció de quina s'ha de dimensionar el tanc (la més elevada), mitjançant les equacions següents:

$$T_1 = T_o + 0{,}1 \cdot T_o$$

$$T_2 = T_o + 15$$

On:

P_o: $Temperatura\ màxima\ d'operació\ de\ la\ columna\ (ºC)$

T_1: $Temperatura\ de\ disseny\ 1\ (ºC)$

T_2: $Temperatura\ de\ disseny\ 2\ (ºC)$

La columna de destil·lació on s'incorpora el tanc pulmó, té una temperatura màxima d'operació de 120ºC, per tant:

$$T_1 = 120 + 0{,}1 \cdot 120 = 132ºC$$

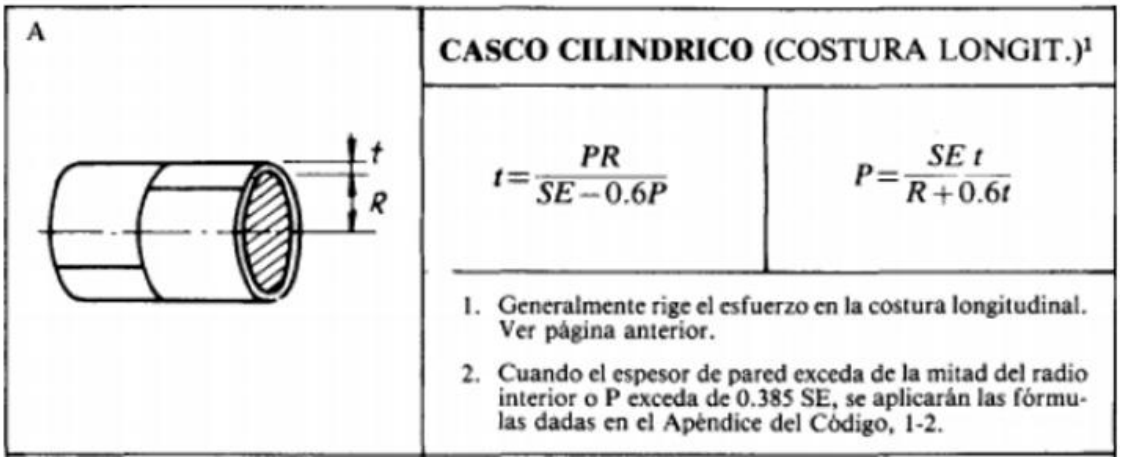
$$T_2 = 120 + 15 = 135ºC$$

El tanc es dissenyarà per una temperatura màxima de 135ºC.

Cal destacar que s'agafa una eficiència de junta de 0,85 i un esforç del material de $1{,}08 \cdot 10^8 Pa$ [34].

11.11.3. Espessor del tanc pulmó

S'utilitzen les equacions del codi ASME [34]:



A	CASCO CILINDRICO (COSTURA LONGIT.)[1]	
	$t = \frac{PR}{SE - 0.6P}$	$P = \frac{SE\,t}{R + 0.6t}$

1. Generalmente rige el esfuerzo en la costura longitudinal. Ver página anterior.
2. Cuando el espesor de pared exceda de la mitad del radio interior o P exceda de 0.385 SE, se aplicarán las fórmulas dadas en el Apèndice del Código, 1-2.

Figura 11.32. Equacions disseny gruix del tanc pulmó.

$$t = \frac{P \cdot R}{S \cdot E - 0{,}6 \cdot P} + C.A.$$

On:

t: $Gruix\ de\ la\ paret\ del\ tanc\ pulmó\ (m)$

P: $Pressió\ de\ disseny\ (Pa)$

R: $Radi\ interior\ del\ tanc\ pulmó\ (m)$

S: $Esforç\ del\ material\ (Pa)$

E: $Eficiència\ de\ la\ junta$

$C.A.$: $Marge\ de\ corrosió\ (m)$

$$t = \frac{376130 \cdot 0{,}3585}{1{,}08 \cdot 10^8 \cdot 0{,}85 - 0{,}6 \cdot 376130} + 0{,}0025 = 3{,}97mm$$

11.11.4. Espessor capçal

S'escull el capçal del tipus toriesfèrics, típics per pressions baixes.

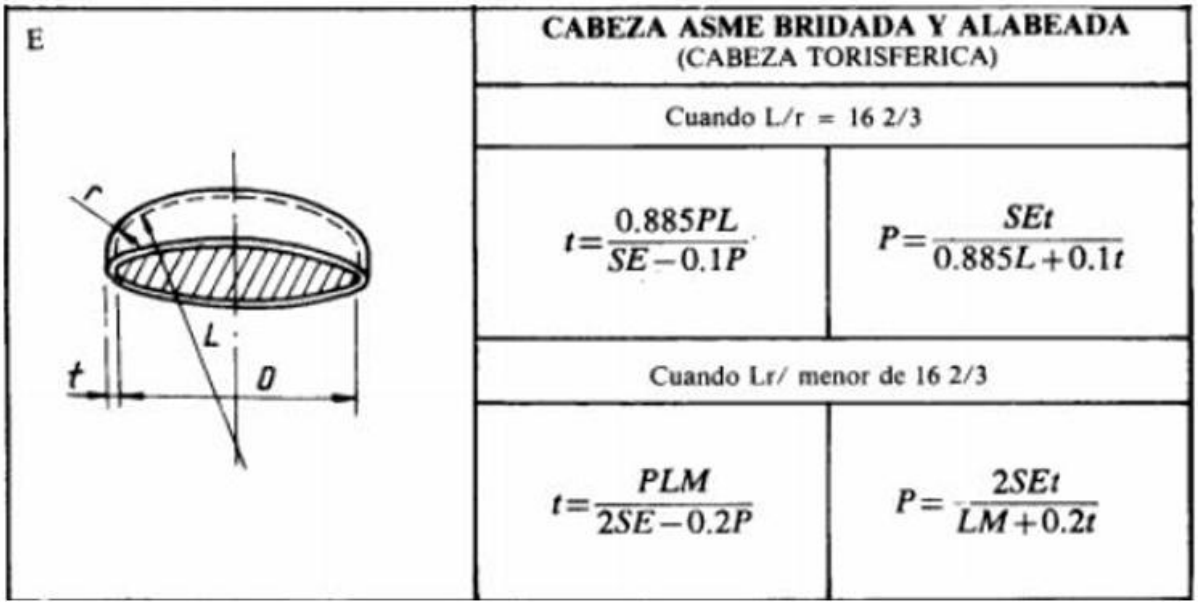


Figura 11.33. Equacions disseny gruix del tanc pulmó.

$$\frac{L}{r}$$

Essent L=radi intern del capçal (diàmetre intern de la torre) i r=10% del radi intern de la torre.

Amb:

$$t = \frac{P \cdot L \cdot M}{2 \cdot S \cdot E - 0{,}2 \cdot P}$$

On:

t: $Gruix\ de\ la\ paret\ (m)$

P: $Pressió\ de\ disseny\ (Pa)$

L: $Radi\ interior\ del\ capçal\ (m)$,

M: $Factor\ M$

S: $Esforç\ del\ material\ (Pa)$

E: $Eficiència\ de\ la\ junta$

VALORES DEL 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	$16\frac{2}{3}$	*
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	
*	LA MAXIMA RAZON PERMITIDA ES: L = D + 2t (véase la nota 2 de la página opuesta)																

Figura 11.34. Valors del fator "M"

Substituint:

$$\frac{L}{r} = \frac{0{,}7169}{0{,}1 \cdot 0{,}7169} = 10; M = 10$$

11.11.5. Diàmetre extern del tanc pulmó

$$D_{ext,tanc} = R_{int,tanc} + 2 \cdot t_c$$

On:

$Dext\ tanc$: $Diàmetre\ extern\ del\ tanc\ pulmó\ (m)$

$Rint\ tanc$: $Radi\ tintern\ del\ tanc\ pulmó\ (m)$

tc: $Gruix\ del\ tanc\ pulmo\ (m)$

Substituïnt:

$$D_{ext,tanc} = 0{,}3585 + 2 \cdot 0{,}003972 = 0{,}7248m$$

11.11.6. Dimensions capçal

Mitjançant una calculadora de fons tipus toriesfèric es calculen les dimensions del capçal, ja que ja s'han calculat els paràmetres necessaris per a la calculadora (Diàmetre extern i espessor).

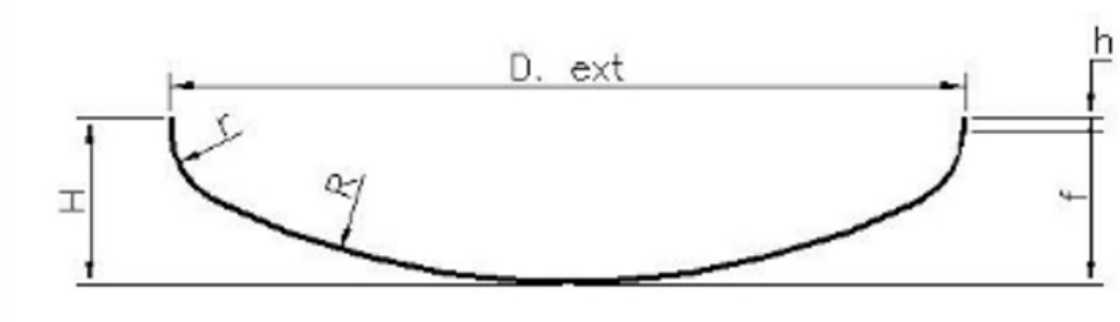


Figura 11.35. Dimensions capçal toriesfèric

Es mostren els valors obtinguts del capçal a continuació.

Taula 11.63. Valors dimensions del capçal

Paràmetre	Valor
Dext (m)	0,7248
Espessor (mm)	2,26
R (m)	0,7248
r (cm)	0,0725
h (m)	0,140
H (m)	0,196

11.11.7. Alçada total del tanc pulmó

Amb l'equació es calcula l'alçada total del tanc pulmó.

$$h_t = h_c + 2 \cdot H$$

On:

ht: $Alçada\ total\ del\ tanc\ pulmó\ (m)$

hc: $Alçada\ de\ la\ part\ cilíndrica\ del\ tanc\ pulmó\ (m)$

H: $Alçada\ total\ del\ capçal\ (m)$

Substituint:

$$h_t = 1{,}075 + 2 \cdot 0{,}196 = 1{,}467m$$

11.11.8. Pes del tanc buit

- **Volum part cilíndrica:**

$$V_{tanc\ buit} = \frac{\pi \cdot h_c}{4} \cdot (D_{ext}^2 \cdot D_{int}^2)$$

Substituïnt;

$$V_{tanc\ buit} = \frac{\pi \cdot 1{,}075}{4} \cdot (0{,}7248^2 \cdot 0{,}7169^2) = 0{,}0069 m^3$$

- **Volum part capçal:**

$$V_{Capçal} = 0{,}1 \cdot (R_{ext}^2 \cdot R^3) + 0{,}1 \cdot (r_{ext}^2 \cdot r^3) + \frac{\pi \cdot h}{4} \cdot (D_{ext}^2 \cdot D_{int}^2) = 0{,}00184 m^3$$

- **Volum total paret:**

$$V_{paret} = V_{tanc} + 2 \cdot V_{Capçal} = 0{,}00969 + 2 \cdot (0{,}00184) = 0{,}01327 m^3$$

- **Pes del tanc buit:**

Amb densitat de l'acer de $7950 kg/m3$;

$$M_{tanc\ buit} = 0{,}01337 \cdot 7950 = 106{,}3 kg$$

- **Pes tanc en operació:**

$$M_{tanc\ operació} = 106{,}3 + 0{,}544 \cdot 930 = 615 kg$$

11.12. Disseny dels mescladors

En aquest apartat es presenta el càlcul i la selecció dels mescladors utilitzats en el procés, a partir de les condicions de cabal, composició i estat físic dels corrents obtinguts a Aspen HYSYS.

El disseny s'ha basat en els criteris indicats al Handbook of Industrial Mixing: Science and Practice[9] ,on es recullen els fonaments de la mescla industrial i els principals paràmetres que condicionen la selecció d'aquests equips.

11.12.1. Disseny mesclador estàtic M-201

Per al dimensionament preliminar del mesclador estàtic M-201 s'ha considerat la barreja d'un corrent principal d'aire amb un corrent secundari de metanol en fase vapor. Aquest equip s'instal·la en línia amb l'objectiu d'aconseguir una mescla homogènia

abans de l'entrada al reactor, garantint una distribució adequada dels reactius en la fase gasosa.

El càlcul s'ha dut a terme seguint la metodologia proposada al *Handbook of Industrial Mixing* [9] per a mescles en règim turbulent.

En primer lloc, s'han definit els cabals volumètrics dels dos corrents. El corrent d'aire presenta un cabal de 9,46 m^3/s, mentre que el corrent de metanol vapor té un cabal de 0,75 m^3/s. Per tant, el cabal volumètric total que circula pel mesclador és:

$$QT = Qaire + QMeOH$$

$$QT = 9{,}46 + 0{,}75 = 10{,}21 \ \frac{m^3}{s}$$

Com que el mesclador s'ubica a la canonada principal d'aire, s'ha adoptat com a diàmetre intern del mesclador el diàmetre d'aquesta canonada:

$$D = 868{,}16 \ mm = 0{,}86816 \ m$$

A partir d'aquest diàmetre, s'ha calculat l'àrea de pas:

$$A = \frac{\pi \cdot D^2}{4} = \frac{\pi \cdot 0{,}86816^2}{4} = 0{,}592 \ m^2$$

La velocitat mitjana de la mescla dins del mesclador és:

$$V = \frac{QT}{A} = \frac{10{,}21}{0{,}592} = 17{,}25 \ \frac{m}{s}$$

Per calcular el nombre de Reynolds, s'han estimat les propietats físiques de la mescla a partir de les propietats dels corrents d'aire i metanol vapor. La densitat mitjana de la mescla s'ha obtingut mitjançant una mitjana ponderada segons el cabal volumètric:

$$\rho mes = \frac{\rho aire \cdot Qaire + \rho MeOH \cdot QMeOH}{QT} = \frac{1{,}665 \cdot 9{,}46 + 1{,}971 \cdot 0{,}75}{10{,}21} = 1{,}687 \ \frac{kg}{m^3}$$

De la mateixa manera, s'ha estimat la viscositat dinàmica de la mescla. Prèviament, les viscositats s'han convertit de cP a Pa·s:

$$\mu aire = 0{,}02184cP = 2{,}184 \cdot 10^{-5} Pa \cdot s$$

$$\mu MeOH = 0{,}006986\, cP = 6{,}986 \cdot 10^{-6}\, Pa \cdot s$$

$$\mu mes = \frac{\mu aire \cdot Qaire + \mu MeOH \cdot QMeOH}{QT} = 2{,}075 \cdot 10^{-5} Pa \cdot s$$

Amb aquests valors, el nombre de Reynolds queda definit com:

$$Re = \frac{\rho mes \cdot D \cdot V}{\mu mes} = 1{,}22 \cdot 10^{6}$$

Aquest valor confirma que el flux es troba clarament en règim turbulent, ja que el nombre de Reynolds és molt superior a 10.000. Per tant, és adequada l'aplicació de les correlacions de mescla turbulenta per a mescladors estàtics.

A continuació, s'ha calculat la fracció volumètrica del component minoritari, que en aquest cas correspon al metanol vapor:

$$Cv = \frac{QMeOH}{QT} = \frac{0{,}75}{10{,}21} = 0{,}07346$$

A partir d'aquesta fracció volumètrica, s'ha determinat el coeficient de variació inicial de la mescla:

$$CoVo = \left(\frac{1 - Cv}{Cv}\right)^{0{,}5} = 3{,}55$$

Com a criteri de disseny, s'ha fixat un coeficient de variació final de:

$$CoVf = 0{,}01$$

Aquest valor representa una mescla amb un grau elevat d'homogeneïtat, adequat per alimentar el reactor amb una composició uniforme. La reducció requerida del coeficient de variació és:

$$CoVr = \frac{CoVf}{CoVo} = 0{,}00282$$

Per a mescladors estàtics en règim turbulent, el *Handbook of Industrial Mixing* correlaciona la reducció del coeficient de variació amb la relació L/D mitjançant una expressió exponencial. A més, per a mescladors tipus SMV, el llibre indica valors de KT entre 100 i 200 i valors de Ki entre 0,21 i 0,46.

La correlació utilitzada és:

$$CoVr = Ki^{\frac{L}{D}}$$

Adoptant un valor mitjà per a un mesclador tipus SMV de Ki=0,33 s'obté:

$$\frac{L}{D} = \frac{\ln(CoVr)}{\ln(Ki)} = 5{,}29$$

Finalment la longitud necessària del mesclador és:

$$L = 5{,}29 \cdot 0{,}86816 = 4{,}59\,m$$

Per tant, es proposa un mesclador estàtic amb un diàmetre intern de 868,16 mm i una longitud aproximada de 4,59 m.

Per últim, s'ha estimat la pèrdua de càrrega associada al mesclador. En primer lloc, s'ha calculat el factor de fricció de Fanning mitjançant l'equació de Blasius:

$$f = \frac{0{,}079}{Re^{0{,}25}} = 0{,}00238$$

La pèrdua de càrrega equivalent en una canonada buida és:

$$\Delta P = 4f \cdot \frac{L}{D} \cdot \rho mes \cdot \frac{V^2}{2} = 13{,}3\,Pa$$

Per estimar la pèrdua de càrrega del mesclador estàtic s'ha aplicat el coeficient KT. Considerant el rang de KT=100-200 i adoptant un valor de KT=150 s'obté:

11.12.2. Disseny mesclador estàtic M-301

Per al dimensionament del mesclador estàtic M-301 s'ha aplicat la metodologia proposada al *Handbook of Industrial Mixing*[9] per a mescles en línia en règim turbulent. A diferència del mesclador M-201, aquest equip presenta tres corrents d'entrada, fet que implica considerar una corrent principal i dos corrents secundàries.

El cabal volumètric total s'ha calculat com la suma de les tres corrents:

$$QT = Q4 + Q17 + Q15 = 0{,}000313 + 0{,}004078 + 0{,}00015 = 0{,}004541 \ \frac{m^3}{s}$$

$$D = 66{,}9 \ mm \ = 0{,}0669 \ m$$

A partir d'aquest diàmetre i del cabal total, s'ha obtingut una velocitat mitjana de circulació de:

$$V = 1{,}29 \ \frac{m}{s}$$

Les propietats físiques de la mescla s'han estimat mitjançant mitjanes ponderades segons el cabal volumètric, obtenint-se:

$$\rho mes = 866{,}58 \ \frac{kg}{m^3}$$

$$\mu mes = 4{,}395 \cdot 10^{-4} \ Pa \cdot s$$

Amb aquests valors, el nombre de Reynolds calculat és:

$$Re = 1{,}7 \cdot 10^5$$

Aquest resultat confirma que el flux es troba clarament en règim turbulent, fet que permet aplicar les mateixes correlacions de mescla turbulenta emprades en el dimensionament anterior.

Per a la determinació de la longitud del mesclador, s'han analitzat els dos corrents secundaris, 4 i 15. Com que aquests corrents tenen cabals molt petits respecte al cabal total, presenten fraccions volumètriques baixes i, per tant, valors elevats del coeficient

de variació inicial. El corrent més desfavorable és la corrent 15, ja que és el que presenta la menor fracció volumètrica:

$$Cv, 15 = 0{,}03303$$

$$CoVo, 15 = 5{,}41$$

Fixant el mateix criteri de qualitat de mescla que en el cas anterior:

$$CoVf = 0{,}01$$

s'obté una reducció requerida del coeficient de variació de:

$$CoVr = 0{,}00185$$

Aplicant la correlació per a mescladors estàtics en règim turbulent i adoptant un valor mitjà de Ki=0,33 s'obté:

$$\frac{L}{D} = 5{,}68$$

Per tant, la longitud necessària del mesclador és:

$$L = 5{,}68 \cdot 0{,}0669 = 0{,}38\, m$$

Finalment, la pèrdua de càrrega s'ha estimat de manera anàloga al cas anterior, utilitzant el factor de fricció de Fanning i el coeficient característic d'un mesclador tipus SMV. La pèrdua de càrrega mitjana estimada és:

$$\Delta Pmesclador = 9{,}58kPa$$

11.13. Disseny de canonades

El correcte dimensionament de les canonades és crucial per al correcte funcionament de la planta. S'han d'escollir diàmetres interns que ens proporcionin un equilibri entre la pèrdua de càrrega generada, i el cost de la canonada en si, tenint sempre present que aquesta ha de poder resistir la pressió, corrosió i temperatura dels fluids que hi circulen.

Com a exemple per a l'explicació dels càlculs s'utilitzarà la primera canonada esmentada en el llistat de canonades, la canonada 150-C1L-316L-105.

11.13.1. Dimensionament de canonada

El primer pas és identificar el fluid que transporta, en aquest cas concret el fluid és metanol en fase líquida. També és important identificar quin tipus de tram és, si d'aspiració (com és aquest cas) o d'impulsió. Al ser metanol escollim com a material acer inoxidable 316L perque la canonada pugui resistir la corrosió generada pel fluid.

En quant a les dimensions de la canonada es segueix el criteri de la Taula 11.64.

Taula 11.64. Velocitats típiques de circulació de fluids.

Tipus de fluid	Tram de ciruclació	Velocitat (m/s)
Líquids no viscosos	Canonada d'aspiració (abans de la bomba)	0,6-0,9
	Canonada d'impulsió o línia de procés	1,5-2,5
Líquids viscosos	Canonada d'aspiració (abans de la bomba)	0,06-0,25
	Canonada d'impulsió o línia de procés	0,15-0,6
Gasos		9-36
Vapor		9-23

En el cas de la canonada 105, al ser la canonada que transporta fluid cap a la bomba, la considerem una canonada d'aspiració, per tant, es suposa una velocitat dins del rang de 0,6-0,9 m/s, en aquest cas es suposa 0,9 m/s.

S'aplica la fórmula de la velocitat per un fluid:

$$v = \frac{F}{A} = \frac{F}{\pi \cdot \frac{D_i^2}{4}}$$

On:

- V= Velocitat (m/s)
- F= Cabal volumètric (m^3/s)
- A= Àrea de pas de la canonada (m^2)
- D_i= Diàmetre intern de la canonada (m)

Si substituïm els valors:

$$0{,}9 = \frac{\frac{6{,}767}{3600}}{\pi \cdot \frac{D_i^2}{4}}$$

Si aïllem el diàmetre intern obtenim un valor de 0,05157 m o 51,57 mm.

Es busca a la taula següent una combinació de diàmetre extern i gruix que doni un diàmetre intern igual o superior a 51,57 mm.

Taula 11.65. Dimensions estàndard per a canonades d'acer.

Dimensiones de Tubos de Acero ANSI B36.10 & 36.19 (Unidad en pulgada)

OCTAL www.octalsteel.com

Tamaño Nominal del Tubo (NPS)		Diámetro Exterior (pulgada)	Tubos Cédula / Pipe Schedule																
NPS	DN	OD	SCH 5s	SCH 10s	SCH 10	SCH 20	SCH 30	SCH 40s	SCH STD	SCH 40	SCH 60	SCH 80s	SCH XS	SCH 80	SCH 100	SCH 120	SCH 140	SCH 160	SCH XXS
1/8	6	0.405		1.240				0.068	0.068	0.068		0.095	0.095	0.095					
1/4	8	0.540		1.650				0.088	0.088	0.088		0.119	0.119	0.119					
3/8	10	0.675		1.650				0.091	0.091	0.091		0.126	0.126	0.126					
1/2	15	0.840	0.065	2.110				0.109	0.109	0.109		0.147	0.147	0.147				0.188	0.294
3/4	20	1.050	0.065	2.110				0.113	0.113	0.113		0.154	0.154	0.154				0.219	0.308
1	25	1.315	0.065	2.770				0.133	0.133	0.133		0.179	0.179	0.179				0.250	0.358
1 1/4	32	1.660	0.065	2.770				0.140	0.140	0.140		0.191	0.191	0.191				0.250	0.382
1 1/2	40	1.900	0.065	2.770				0.145	0.145	0.145		0.200	0.200	0.200				0.281	0.400
2	50	2.375	0.065	2.770				0.154	0.154	0.154		0.218	0.218	0.218				0.344	0.436
2 1/2	65	2.875	0.083	3.050				0.203	0.203	0.203		0.276	0.276	0.276				0.375	0.552
3	80	3.500	0.083	3.050				0.216	0.216	0.216		0.300	0.300	0.300				0.438	0.600
3 1/2	90	4.000	0.083	3.050				0.226	0.226	0.226		0.318	0.318	0.318					
4	100	4.500	0.083	3.050				0.237	0.237	0.237		0.337	0.337	0.337		0.438		0.531	0.674
5	125	5.563	0.109	3.400				0.258	0.258	0.258		0.375	0.375	0.375		0.500		0.625	0.750
6	150	6.625	0.109	3.400				0.280	0.280	0.280		0.432	0.432	0.432		0.562		0.719	0.864
8	200	8.625	0.109	3.760		0.250	0.277	0.322	0.322	0.322	0.406	0.500	0.500	0.500	0.594	0.719	0.812	0.906	0.875
10	250	10.750	0.134	4.190		0.250	0.307	0.365	0.365	0.365	0.500	0.500	0.500	0.594	0.719	0.844	1.000	1.125	1.000
12	300	12.750	0.156	4.570		0.250	0.330	0.375	0.375	0.406	0.562	0.500	0.500	0.688	0.844	1.000	1.125	1.312	1.000
14	350	14.000	0.156	4.780	0.250	0.312	0.375		0.375	0.438	0.594		0.500	0.750	0.938	1.094	1.250	1.406	
16	400	16.000	0.165	4.780	0.250	0.312	0.375		0.375	0.500	0.656		0.500	0.844	1.031	1.219	1.438	1.594	
18	450	18.000	0.165	4.780	0.250	0.312	0.438		0.375	0.562	0.750		0.500	0.938	1.156	1.375	1.562	1.781	
20	500	20.000	0.188	5.540	0.250	0.375	0.500		0.375	0.594	0.812		0.500	1.031	1.281	1.500	1.750	1.969	
22		22.000	0.188	5.540	0.250	0.375	0.500		0.375		0.875		0.500	1.125	1.375	1.625	1.875	2.125	
24	600	24.000	0.218	6.350	0.250	0.375	0.562		0.375	0.688	0.969		0.500	1.219	1.531	1.812	2.062	2.344	
26		26.000			0.312	0.500	0.000		0.375				0.500						
28	700	28.000			0.312	0.500	0.625		0.375				0.500						
30		30.000	0.250	7.920	0.312	0.500	0.625		0.375				0.500						
32	800	32.000			0.312	0.500	0.625		0.375	0.688			0.500						
34		34.000			0.312	0.500	0.625		0.375	0.688			0.500						
36	900	36.000			0.312	0.500	0.625		0.375	0.750			0.500						
38		38.000							0.375				0.500						
40	1000	40.000						0.375											
42		42.000				0.500			0.375	0.750			0.500						
44	1100	44.000							0.375				0.500						
46		46.000							0.375				0.500						
48	1200	48.000							0.375			0.500							

Primer s'escull un diàmetre extern, com per exemple un DN50, que correspon a 2.375 inch o 60,325 mm amb un gruix o "schedule" corresponent al SCH 5s que té un valor de

0,065 inch o 1,651 mm. Al diàmetre extern es resta dos cops el gruix de canonada i s'obté el diàmetre intern:

$$60{,}325 - 1{,}651 \cdot 2 = 57{,}023\ mm$$

Un cop es té la informació del diàmetre intern es torna a calcular la velocitat del fluid, per comprovar que realment ens trobem dins d'un rang acceptable.

$$v = \frac{\frac{6{,}767}{3600}}{\pi \cdot \frac{(\frac{57{,}023}{1000})^2}{4}} = 0{,}736$$

En alguns casos no s'han seguir els valor típics de la taula 11.65 degut a que la pèrdua de pressió generada per algunes canonades era massa alta i s'ha decidit optar per un DN superior.

11.13.2. Pèrdua de pressió

Els fluids tant gasosos com líquids pateixen una pèrdua de pressió per el fregament contra les parets de les canonades o contra els diferents accidents en el seu camí, com poden ser les vàlvules. Calcular aquesta pèrdua de pressió és important ja que així podem assegurar que els fluids arriben amb suficient pressió als diferents equips, a més de ser necessari per al posterior càlcul de les bombes.

S'utilitzarà com a exemple la canonada 150-C1L-316L-101. Aquest tram inicia als camions de transport de metanol i finalitza a l'entrada de la bomba P-101a o P-101b.

L'equació que es farà servir és la següent[10]:

$$P_1 - P_2 = 4f \cdot \rho \cdot \frac{v^2 \cdot L}{2 \cdot D}$$

En aquest cas suposarem que la pressió al camió (P_1) és atmosfèrica, per tant 101.325 Pa.

El diàmetre intern de la canonada 101 és de 162,738 mm o 0,162 m.

La velocitat del fluid és calcula seguint el procediment explicat a l'apartat de dimensionament de la canonada 11.8.1., donant un resultat de 0,801m/s.

La longitud total del tram serà la longitud total del tram de canonada més la longitud equivalent dels diferents accidents. Aquesta longitud equivalent es calcula a partir dels coeficients dels diferents accidents segons la taula següent:

Taula 11.66. Valors dels coeficients dels accidents.

Accident	Coeficient K
Vàlvula de bola	0,1
Vàlvula de papallona	0,85
Vàlvula antiretorn	2,5
Vàlvula de globus	10
Colze	0,4
Te	1,5
Filtre	5

A partir de la següent equació es poden transformar els coeficients K en L_{eq}.

$$L_{eq} = \frac{K \cdot D}{4f}$$

Al tram es troben dues vàlvules de bola, un colze, i una te, per tant

$$K = 2 \cdot 0,1 + 0,4 + 1,5 = 2,1$$

El factor 4f es calcula a partir de la següent equació:

$$4f = \frac{0,25}{\left(Log_{10}\left(\frac{\varepsilon}{3,7 \cdot D} + \frac{5,74}{Re^{0,9}}\right)\right)^2}$$

En el cas de l'acer 316L s'ha utilitzat la rugositat de l'acer comercial ε=0,000046m

El nombre de Reynolds es pot calcular a partir de la següent equació:

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

On:

$\rho = Densitat\ del\ fluid\ (Kg/m3)$

$D = Diàmetre\ intern\ de\ la\ canonada\ (m)$

$v = Velocitat\ del\ fluid\ (m/s)$

$\mu = Viscositat\ del\ fluid\ (Pa \cdot s)$

En el cas del fluid de la canonada 101 (metanol) la densitat és de 786 kg/m^3, la viscositat és de 0,0005447 Pa*s, la velocitat és de 0,801m/s i el diàmetre intern de 0,162m. Substituint les dades:

$$Re = \frac{786 \cdot 0,186 \cdot 0,801}{0,0005447} = 188170$$

Substituint ara a l'equació per a calcular 4f:

$$4f = \frac{0,25}{\left(Log_{10}\left(\frac{0,000046}{3,7 \cdot 0,186} + \frac{5,74}{188170^{0,9}}\right)\right)^2} = 0,0176$$

Substituint ara a l'equació per a calcular la longitud equivalen:

$$L_{eq} = \frac{2,1 \cdot 0,186}{0,0176} = 22,2\ m$$

Sumant aquests 22,2m de longitud equivalent als 2,746m de canonada obtenim un valor total de L=24,946m

Finalment substituint a l'equació per calcular la pèrdua de pressió:

$$P_1 - P_2 = 0,0176 \cdot 786 \cdot \frac{0,801^2 \cdot 24,946}{2 \cdot 0,186} = 595,19\ Pa$$

Com P_1 = 101325 Pa, sabem que el fluid arriba a la bomba amb una pressió de 100729 Pa o 1,007 Bar

El mateix procediment s'aplica a totes les canonades, fixant diferents punts per P_1 o P_2, i amb els valors d'operació de cada canonada (diàmetre, viscositat, densitat, etc...).

11.14. Càlcul de bombes i compressors

Per a un correcte funcionament de la planta és important dimensionar de forma adequada els equips d'impulsió de fluids, per tal de no consumir energia de forma innecessària i poder arribar a les condicions operatives de forma satisfactòria.

11.14.1. Dimensionament de les bombes

Per dimensionar correctament les bombes és necessari calcular la càrrega, el NPSH disponible i la potència necessària. Com a exemple s'utilitzarà la bomba P-101, la qual transporta metanol dels camions fins al tanc.

11.14.1.1 Càlcul del NPSH disponible

La fórmula del NPSH disponible és la següent[11]:

$$NPSH_d = (Z_1 - Z_2) + \frac{1}{g}\left(\frac{P_1 - P_v}{\rho} + \frac{1}{2}\left(\frac{v_2^2}{\alpha} - \frac{v_1^2}{\alpha}\right) - e_v\right)$$

On:

$Z = Altura\ (m)$

$g = Acceleració\ de\ la\ gravetat\ (9{,}81 m/s2)$

$P = Pressió\ (Pa)$

$Pv = Pressió\ de\ vapor\ del\ fluid\ (Pa)$

$\alpha = Coeficient\ de\ correcció\ d'energia\ cinètica\ (adimensional)$

$ev = Pèrdues\ per\ fricció\ (J/Kg)$

$\rho = Densitat\ del\ fluid\ (Kg/m3)$

$v = Velocitat\ del\ fluid\ (m/s)$

En aquest cas assumirem que la bomba i el camió es troben a aproximadament la mateixa alçada, per tant, el terme de les altures és igual a 0.

La pressió de vapor del fluid a la canonada 101 (canonada d'aspiració de la bomba P-101), té un valor de 16970 Pa.

La densitat del metanol en aquesta canonada és de 786 Kg/m^3.

La pressió inicial al camió és 1atm o 101325 Pa.

El coeficient α és aproximadament 1 per a corrents turbulents. Es considera corrent turbulent quan Re>4000. El valor de Re de la canonada 101 s'ha calculat a l'apartat 11.14.2. i té un valor de 188170.

La velocitat inicial del fluid es considera 0, ja que la superfície del fluid al camió es troba en repòs.

La velocitat final del fluid es considera la velocitat a la canonada. La velocitat de la canonada 101 s'ha calculat seguint el procediment de l'apartat 11.8.1. donant un valor de 0,801 m/s.

Les pèrdues de càrrega e_v es calculen a partir de la següent equació:

$$(e_v)_{rec} = 4f \cdot \frac{v^2 \cdot L}{2 \cdot D}$$

On:

$4f = Coeficient\ de\ Darcy - Weisbach\ (adimensional)$

$v = Velocitat\ del\ fluid\ (m/s)$

$L = Longitud\ del\ tram\ (m)$.

$D = Diàmetre\ de\ la\ canonada\ (m)$.

La longitud utilitzada serà la suma de les longituds dels trams rectes i la longitud equivalents dels accidents. Aquest valor per a la canonada 101 ha estat calculat a l'apartat 11.8.2. amb un valor de 24,946m.

El factor de Darcy per a aquest tram ha estat calculat a l'apartat 11.8.2. amb un valor de 0,0176.

El diàmetre de la canonada 101 és de 0,186 m.

Substituint els valors a l'equació per calcular e_v:

$$(e_v)_{rec} = 0,0176 \cdot \frac{0,801^2 \cdot 24,946}{2 \cdot 0,186} = 0,757\ \frac{J}{kg}$$

Substituint ara tots els valors a l'equació del NPSH disponible:

$$NPSH_d = \frac{1}{9,81}\left(\frac{101325 - 16970}{786} + \frac{1}{2}\left(\frac{0,801^2}{1}\right) - 0,757\right) = 10,89\ m$$

El càlcul varia lleugerament a l'utilitzat en la fitxa tècnica de la bomba, ja que s'ha fet servir un full de càlcul d'Excel, el qual fa servir més xifres decimals.

11.14.1.2. Càlcul de la càrrega de la bomba

La fórmula per calcular la càrrega de la bomba és la següent:

$$h = (Z_2 - Z_1) + \frac{1}{g}\left(\frac{P_2 - P_1}{\rho} + \frac{1}{2}\left(\frac{v_2^2}{\alpha} - \frac{v_1^2}{\alpha}\right) + e_v\right)$$

On:

$Z = Altura\ (m)$

$g = Acceleració\ de\ la\ gravetat\ (9{,}81m/s2)$

$P = Pressió\ (Pa)$

$Pv = Pressió\ de\ vapor\ del\ fluid\ (Pa)$

$\alpha = Coeficient\ de\ correcció\ d'energia\ cinètica\ (adimensional)$

$ev = Perdues\ per\ fricció\ (J/Kg)$

$\rho = Densitat\ del\ fluid\ (Kg/m3)$

$v = Velocitat\ del\ fluid\ (m/s)$

La diferència d'alçada entre el punt inicial (camió de transport) i el punt final (part superior del tanc de metanol) és de 9 m.

Tant la pressió al tanc com la pressió al camió és de 1atm, per tant, el terme de pressions s'elimina.

La velocitat final és la velocitat en la canonada d'entrada al tanc de metanol. Aquesta velocitat es calcula per a la canonada 90-C1L-316L-103 amb el mètode explicat a l'apartat 11.8.1. donant un valor de 2.238 m/s.

La velocitat inicial és la de la canonada d'aspiració. Aquesta canonada és la 101 amb un valor de velocitat de 0,801 m/s.

Les pèrdues de càrrega s'han calculat per a tots els trams implicats des del camió fins al tanc de formaldehid mitjançant el mètode explicat a l'apartat 11.9.2.1. El valor total de les pèrdues és de 32,26 J/kg.

Substituint a l'equació obtenim:

11.14.1.3. Càlcul de la potència de la bomba

Per calcular la potència de la bomba s'utilitza la següent equació:

$$Pot = \frac{\rho \cdot g \cdot F \cdot h}{1000 \cdot \eta}$$

On:

$\rho = Densitat\ del\ fluid\ (Kg/m3)$

$g = Acceleració\ de\ la\ gravetat\ (9{,}81m/s2)$

$F = Cabal\ volumètric\ (m3/s)$

$h = Càrrega\ de\ la\ bomba\ (m)$

$\eta = Rendiment\ de\ la\ bomba\ (adimensional)$

La densitat del fluid d'entrada a la bomba és de 786 kg/m^3 a la canonada 101.

El cabal volumètric de la canonada 101 és de 0,0167 m^3/s.

La càrrega de la bomba P-101 s'ha calculat a l'apartat 11.14.2.2. donant un valor de 12,51m.

El rendiment s'ha fixat a un 65%.

Substituint tots els valors es calcula la potència:

$$Pot = \frac{786 \cdot 9,81 \cdot 0,0167 \cdot 12,51}{1000 \cdot 0,65} = 2,47\ kW$$

11.14.2. Dimensionament dels compressors

11.14.2.1. Càlcul de la potència del compressor.

Per calcular la potència del compressor s'utilitza la següent equació[12]:

$$Pot = (P_2 - P_1) \cdot F \cdot \frac{1}{\eta}$$

On:

$F = Cabal\ volumètric\ d'aspiració\ (m3/s)$

$P = Pressió\ abans\ y\ després\ del\ compressor\ (Pa)$

$\eta = Rendiment\ del\ compressor\ (adimensional)$

Per al cas del compressor C-201 el cabal d'aspiració és de 48081 m^3/h, la pressió d'entrada és de 101.100 Pa i la pressió de sortida de 171.800 Pa. S'ha suposat un rendiment d'un 65%. Substituint a l'equació s'obté:

$$Pot = (171800 - 101100) \cdot \frac{48081}{3600} \cdot \frac{1}{0,65} = 1452703\ w = 1453\ kW$$

11.15. Bibliografia

[1]] ASPEN TECHNOLOGY, INC. (s. f.). Aspen HYSYS: Leading process simulation software. Aspen HYSYS | Leading Process Simulation Software for Oil & Gas | AspenTech

[2] AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS. (2025a). BPVC Section VIII, Division 1: Rules for construction of pressure vessels. ASME.

[3] AMERICAN SOCIETY OF MECHANICAL ENGINEERS. (2025b). BPVC Section II, Part D: Materials—Properties (Metric). ASME.

[4] PENG, D.-Y., & ROBINSON, D. B. (1976). A new two-constant equation of state. Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals, 15(1), 59–64. https://doi.org/10.1021/i160057a011

[5] THYSSENKRUPP MATERIALS UK. (s. f.). Stainless steel 316L – 1.4404 data sheet. Stainless Steel 316L - 1.4404 Data Sheet - thyssenkrupp Materials (UK)

[6] MTE GROUP. (s. f.). Metal Pall Ring. Metal pall ring - MTE Group | Improving mass transfer

[7] GREEN, D. W., & SOUTHARD, M. Z. (EDS.). (2018). Perry's Chemical Engineers' Handbook (9th ed.). McGraw-Hill Education.

[8] BRIGHTON TRU-EDGE. (2017). *ASME 80-10 flanged and dished heads*. Brighton_Spec_ASME_80-10_2017.pdf

[9] PAUL, E. L., ATIEMO-OBENG, V. A., & KRESTA, S. M. (EDS.). (2004). *Handbook of industrial mixing: Science and practice*. John Wiley & Sons.

[10] SARRÁ, M. (14 de octubre de 2023). *Tema 2. Fluids incompressibles* [Diapositivas de la asignatura Circulació de Fluids]. Campus Virtual, Universitat Autònoma de Barcelona.

[11] SARRÁ, M. (s. f.). *Tema 2. Fluids incompressibles: Concepte de càrrega i NPSH* [Diapositivas de la asignatura Circulació de Fluids]. Campus Virtual, Universitat Autònoma de Barcelona.

[12] SARRÀ, M. (s. f.). *Tema 3: Fluids compressibles. Circulació isoterma* [Diapositivas de la asignatura Circulació de Fluids]. Campus Virtual, Universitat Autònoma de Barcelona.

[13] «API 650: WELDED STEEL TANKS FOR OIL STORAGE,» AMERICAN PETROLEUM INSTITUTE, 01 02 2012. [En línea]. Available: https://law.resource.org/pub/us/cfr/ibr/002/api.650.2007.pdf.

[14] REUSS, G., DISTELDORF, W., GAMER, A.O., HILT, A. (2003). Formaldehyde. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Wiley-VCH, Weinheim.

[15] SMITH, J.M., VAN NESS, H.C., ABBOTT, M.M. (2018). Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics, 8th ed. McGraw-Hill, New York.

[16] MARS, P., VAN KREVELEN, D.W. (1954). Oxidations carried out by means of vanadium oxide catalysts. Chemical Engineering Science, 3 (Supplement), 41–59.

[17] NFPA 68 (2018). Standard on Explosion Protection by Deflagration Venting. National Fire Protection Association, Quincy, MA.

[18] DESHMUKH, S.A.R.K., VAIDYA, M.J., VANNICE, M.A. (2005). Selective oxidation of methanol to formaldehyde over iron molybdate catalysts. Industrial & Engineering Chemistry Research, 44(2), 252–263.

[19] FOGLER, H.S. (2016). Elements of Chemical Reaction Engineering, 5th ed. Prentice Hall, Boston, capítol 8.

[20] BIRD, R.B., STEWART, W.E., LIGHTFOOT, E.N. (2007). Transport Phenomena, 2nd ed. Wiley, New York.

[21] NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY (2024). NIST Chemistry WebBook, SRD 69. https://webbook.nist.gov

[22] EASTMAN CHEMICAL COMPANY (2020). Therminol 66 Heat Transfer Fluid — Product Bulletin. Publication No. 7239274D. https://www.therminol.com

[23] ERGUN, S. (1952). Fluid flow through packed columns. Chemical Engineering Progress, 48(2), 89–94.

[24] ASME (2016). ASME B36.10M/B36.19M — Welded and Seamless Wrought Steel Pipe. American Society of Mechanical Engineers.

[25] TEMA (2019). Standards of the Tubular Exchanger Manufacturers Association, 10th ed. TEMA Inc., Tarrytown, NY

[26] SINNOTT, R.K., TOWLER, G. (2020). Chemical Engineering Design — Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design, 6th ed. Butterworth-Heinemann, Oxford.

[27] ASME (2019). Boiler and Pressure Vessel Code, Section VIII, Division 1. American Society of Mechanical Engineers.

[28] PERRY, R.H., GREEN, D.W. (2019). Perry's Chemical Engineers' Handbook, 9th ed. McGraw-Hill.

[29] ASME (2019). BPVC Section VIII Division 1, UG-27. American Society of Mechanical Engineers.

[30] KERN, D.Q. (1950). Process Heat Transfer. McGraw-Hill, New York.

[31] DIXON, A.G. (1988). Wall and particle-shape effects on heat transfer in packed beds. Chemical Engineering Communications, 71(1), 217–237.

[32] VALERO, F.; SUAU, T. *Disseny de bescanviadors de calor de carcassa i tubs sense canvi de fase. Mètode de Kern*. Departament d'Enginyeria Química, Universitat Autònoma de Barcelona.

[33] TOWLER, G.; SINNOTT, R. *Chemical Engineering Design*, capítulo de heat-transfer equipment

[34] ASME Boiler and Pressure Vessel Code. Volume VIII, Division 1 RULES FOR CONSTRUCTION OF PRESSURE VESSELS. 2010 Edition. The American Society of Mechanical Engineers. Three Park Avenue, New York, NY.