FORMICS
INDUSTRIAL CHEMICAL
FORMALDEHIDO DE CALIDAD

PLANTA DE PRODUCCIÓN DE FORMALDEHÍDO

LUIS M. APARICIO SÁNCHEZ
ALEJANDRO JUÁREZ SÁNCHEZ
MASOUMEH HONARKAR ASHNA
MANEL NÁJERA ROCABAYERA
EDUARD MARTÍ CARDONER
DAVID A. SARRIA VALDIVIA

TUTOR : JOSEP A. TORÀ SUAREZ

JUNIO 2026

UAB
Universitat Autònoma de Barcelona

CC BY NC ND

FORMICS
INDUSTRIAL CHEMICAL
FORMALDEHIDO DE CALIDAD

PLANTA DE PRODUCCIÓN DE FORMALDEHÍDO

CAPÍTULO 11. MANUAL DE CÁLCULO

UAB
Universitat Autònoma de Barcelona

CC BY NC ND

Tabla de contenido

Capítulo 11. Manual de cálculo 1
11.1 Diseño de los tanques de almacenamiento (T-101, T-102, T-103, T-104, T-401, T-402, T-403 y T-404) 1
11.1.1 Diseño de los tanques de almacenamiento de metanol 1
11.1.2 Diseño de los tanques de almacenamiento de formol al 37 % 6
11.2 Diseño del reactor (R-201 y R-202) 8
11.2.1 Observaciones previas al diseño 8
11.2.2 Diseño del reactor 10
11.2.3 Código Matlab 27
11.3 Diseño de la torre de absorción (CA-301) 30
11.3.1 Objeto del cálculo 30
11.3.2 Hipótesis y condiciones de operación 30
11.3.3 Balance de materia en el absorbedor 31
11.3.4 Equilibrio gas-líquido y ley de Henry 33
11.3.5 Cálculo del diámetro del absorbedor 34
11.3.6 Recta operativa 35
11.3.7 Cálculo del número de unidades de transferencia (NTU) 35
11.3.8 Altura del absorbedor 35
11.3.9 Verificación hidráulica 36
11.3.10 Resultado final del diseño 36
11.4 Diseño del Scrubber (LG-301) 37
11.5 Diseño de los intercambiadores de calor 40
11.5.1 Diseño de los intercambiadores 41
11.6 Diseño de las tuberías 47
11.6.1. Caudal volumétrico, velocidad y diámetros 47
11.6.2. Selección del material y del diámetro comercial 48
11.7 Diseño de las bombas 50
11.7.1 Carga total 50
11.7.2 NPSH disponible 51
11.7.3 Potencia total 52
11.8 Bibliografía 53

Capítulo 11. Manual de cálculo

11.1 Diseño de los tanques de almacenamiento (T-101, T-102, T-103, T-104, T-401, T-402, T-403 y T-404)

11.1.1 Diseño de los tanques de almacenamiento de metanol

11.1.1.1 Volumen a almacenar

El volumen de metanol que es necesario almacenar en la planta se ha determinado sumando la cantidad que se usa de este componente para la reacción y para el bypass. Conocida la cantidad necesaria de metanol para poder fabricar durante un día se ha multiplicado este valor por 7, asegurando así la producción semanal y evitando posibles contratiempos con los recursos de esta materia prima y al dividir este valor por la densidad del metanol y añadiendo un margen del 14 % para tener espacio de seguridad donde se inertizará con nitrógeno, se ha obtenido el siguiente volumen a almacenar:

$$V_{met.\,a\,almacenar} = (129203{,}16 + 30667{,}00)\ kg/d \cdot 7\ d \cdot \frac{1\ m^3}{792\ kg} \cdot 1{,}14 = 1610{,}81\ m^3$$

Cabe recalcar que a pesar del metanol no ser tan corrosivo como el formaldehído también se ha usado acero inoxidable 316L para sus tanques de almacenamiento, esto debido a que se ha tenido en consideración la ubicación de la planta, la cual al estar en Tarragona cerca del mar esto podría generar problemas de corrosión en los tanques, así que al optar por este tipo de material Formics se cubre ante estás posibles incidencias.

11.1.1.2 Volumen de los tanques

Se ha decidido distribuir el metanol en 4 tanques iguales, siendo necesario así tanques del siguiente volumen:

$$V = \frac{1610{,}81\ m^3}{4} = 402{,}7\ m^3$$

De estos, el volumen ocupado por metanol es:

$$V_{met.} = \frac{402{,}7\ m^3}{1{,}14} = 353{,}25\ m^3$$

11.1.1.3 Dimensionamiento de los tanques

Para estos tanques se ha escogido una relación $\frac{H}{D_i} = 1$, por lo que se obtienen así estos parámetros:

$$V = \frac{\pi}{4} \cdot D_i^2 \cdot H \rightarrow D_i = H = \sqrt[3]{(\frac{V}{\pi} \cdot 4)} = \sqrt[3]{(\frac{402{,}7\ m^3}{\pi} \cdot 4)} = 8\ m$$

Y la altura máxima del metanol es de:

$$H_{líq.} = \frac{V_{met.}}{\pi \cdot D_i^2} \cdot 4 = \frac{353{,}25\ m^3}{\pi \cdot (8\ m)^2} \cdot 4 = 7{,}02\ m$$

11.1.1.4 Presión

Se ha obtenido la presión de diseño como la suma de la ejercida por el metanol y por el nitrógeno y se ha adicionado un 14 % de sobredimensionamiento por seguridad:

$$P_{met.} = H_{líq.} \cdot g \cdot \rho_{met.} = 7{,}02\ m \cdot 9{,}81\ m/s^2 \cdot 792\ kg/m^3 = 54549{,}12\ Pa$$

$$P_{met.} = 54549{,}12\ Pa \cdot \frac{1\ bar}{10^5\ Pa} = 0{,}55\ bar$$

$$P_{nitrógeno} = 0{,}05\ bar$$

$$P_{diseño} = (P_{met.} + P_{nitrógeno}) \cdot 1{,}14 = 0{,}68\ bar \rightarrow 0{,}68\ bar \cdot \frac{14{,}50\ psi}{1\ bar} = 9{,}85\ psi$$

11.1.1.5 Espesores

Una vez dimensionados los tanques y concretadas las presiones que tendrán que resistir, se procede a especificar el espesor de las diversas partes de estos teniendo en cuenta que para su confección se usará acero inoxidable 316L.

Se ha seleccionado para el metanol una configuración de fondo plano, cuerpo cilíndrico y cabezal elipsoidal.

Para el fondo plano la normativa API 650 Sección 5.4 indica que el espesor ha de ser por lo menos de 6 mm, a lo que se le ha de agregar un margen de corrosión, el cual se ha escogido de 2 mm para esta parte, por lo tanto, el fondo plano ha de tener un espesor de 8 mm el cual es un estándar.

Para el cuerpo cilíndrico se ha usado la fórmula siguiente:

$$t_{cuerpo} = \frac{P_{diseño} \cdot R_i}{Sd \cdot E - (0{,}6 \cdot P_{diseño})} + C.A.$$

Donde:

$P_{diseño}$ está en psi: 9,85 psi

R_i es el radio interno del tanque: $\frac{8\ \square}{2} \cdot \frac{10^3\ \square\square}{1\ \square} \cdot \frac{1\ \square\square\square\square}{25{,}4\ \square\square} = 157{,}56\ \square\square\square\square$

Sd es el límite elástico: 25000 psi

E es la eficiencia de la junta: 0,9

C.A. es el margen por corrosión: 3 mm = 0,12 pulg

Sustituyendo se obtiene el siguiente espesor para el cuerpo cilíndrico:

$$t_{cuerpo} = \frac{9{,}85\ psi \cdot 157{,}56\ pulg}{25000\ psi \cdot 0{,}9 - (0{,}6 \cdot 9{,}85\ psi)} + 0{,}12\ pulg = 0{,}19\ pulg$$

$$t_{cuerpo} = 0{,}19\ pulg \cdot \frac{25{,}4\ mm}{1\ pulg} = 4{,}75\ mm$$

Pero según la norma API 650 Sección 5.6.1.1, por razones de rigidez, el espesor mínimo nominal de esta parte ha de ser de mínimo 5 mm para tanques de diámetro nominal inferior a 15 m, y con la seguridad añadida por corrosión se ha optado por un espesor de 8 mm.

En cuanto al cabezal elipsoidal, su espesor se ha calculado mediante la siguiente fórmula:

$$t_{cabezal} = \frac{P_{diseño} \cdot D_i}{2 \cdot Sd \cdot E - (0{,}2 \cdot P_{diseño})} + C.A$$

Y sustituyendo se obtiene:

$$t_{cuerpo} = \frac{9{,}85\ psi \cdot 157{,}56\ pulg \cdot 2}{2 \cdot 25000\ psi \cdot 0{,}9 - (0{,}2 \cdot 9{,}85\ psi)} + 0{,}12\ pulg = 0{,}19\ pulg$$

$$t_{cabezal} = 0{,}19\ pulg \cdot \frac{25{,}4\ mm}{1\ pulg} = 4{,}75\ mm$$

Pero según la norma API 650 Sección 5.10.2.2, está especifica que las láminas del techo deben tener un espesor nominal mínimo de 5 mm más la tolerancia de corrosión, por lo que también se usará un espesor de 8 mm.

11.1.1.6 Peso

El peso de los recipientes se ha obtenido sumando el de sus diversas partes:

Para el peso del cuerpo:

$$Peso_{\ cuerpo} = \pi \cdot H \cdot D \cdot t_{cuerpo} \cdot \rho_{acero\ inox.}$$

Donde la densidad del acero inoxidable 316L es 8070 kg/m^3.

$$Peso_{cuerpo} = \pi \cdot 8\,m \cdot 8\,m \cdot 8\,mm \cdot \frac{1\,m}{10^3\,mm} \cdot 8070\,kg/m^3 = 12993{,}02\,kg$$

Para el peso del cabezal:

$$Peso_{cabezal} = \frac{\pi}{4} \cdot D^{\,2}_{general} \cdot t_{cabezal} \cdot \rho_{acero\ inox.}$$

Donde el diámetro general se calcula de la siguiente manera:

$$D_{general} = D_{ext} + \frac{D_{ext}}{42} + 2 \cdot SF + \frac{2}{3} \cdot Kr$$

Siendo:

El D_{ext}: $D_i + 2 \cdot t_{cabezal} = 8\,m + 2 \cdot 8\,mm \cdot \frac{1\,m}{10^3\,mm} = 8{,}02\,m$

El SF (Straight Face): 0,07 m

El Kr (Knuckle Radius): $D_i \cdot 0{,}17 = 8\,m \cdot 0{,}17 = 1{,}36\,m$

Sustituyendo:

$$D_{general} = 8{,}02\,m + \frac{8{,}02\,m}{42} + 2 \cdot 0{,}07\,m + \frac{2}{3} \cdot 1{,}36\,m = 9{,}26\,m$$

Obteniendo el siguiente peso:

$$Peso_{cabezal} = \frac{\pi}{4} \cdot (9{,}26\,m)^2 \cdot 8\,mm \cdot \frac{1\,m}{10^3\,mm} \cdot 8070\,kg/m^3 = 4345{,}88\,kg$$

Para el peso del fondo:

$$Peso_{fondo} = \frac{\pi}{4} \cdot D^2_{ext} \cdot t_{fondo} \cdot \rho_{acero\ inox.}$$

$$Peso_{fondo} = \frac{\pi}{4} \cdot (8{,}02\,m)^2 \cdot 8\,mm \cdot \frac{1\,m}{10^3 mm} \cdot 8070\,kg/m^3 = 3261{,}26\,kg$$

Sumando todos los pesos se obtiene el de cada tanque de almacenamiento:

$$Peso_{vacío} = Peso_{cuerpo} + Peso_{cabezal} + Peso_{fondo}$$

$$Peso_{vacío} = (12993{,}02 + 4345{,}88 + 3261{,}26)\,kg = 20600{,}16\,kg$$

Con este valor se puede especificar el peso correspondiente a cada tanque cuando se encuentren llenos:

$$P_{lleno} = P_{vacío} + V_{met.} \cdot \rho_{met.} = 20600{,}16\,kg + 353{,}25\,m^3 \cdot 792\,kg/m^3 = 300372{,}95\,kg$$

11.1.1.7 Venteo

Al ser el metanol un líquido inflamable se ha instalado un sistema de venteo que permita evitar un incidente mayor en caso de que se produzca un incendio alrededor de los tanques de almacenamiento.

El caudal de venteo de emergencia se calcula de la siguiente manera:

$$C_{venteo\ emerg.} = \frac{Q}{\lambda}$$

Donde Q es el calor recibido en caso de incendio y se calcula como:

$$Q = 1000 \cdot 139{,}7 \cdot F \cdot A_{hum.}^{0{,}82}$$

Teniendo F un valor de 1 al no contar estos tanques con aislamiento térmico, y habiendo de calcular el área húmeda de la siguiente forma:

$$A_{hum} = \pi \cdot D \cdot H_{líq} = \pi \cdot 8\,m \cdot 7{,}02\,m = 176{,}54\,m^2$$

Por lo que se calcula que Q tiene el siguiente valor:

$$Q = 1000 \cdot 139{,}7 \cdot 1 \cdot 176{,}54^{\,0{,}82} = 9718667{,}82\,\frac{kJ}{h}$$

Y el calor latente de vaporización es de 1129 kJ/kg, obteniendo el siguiente caudal de venteo de emergencia:

$$C_{venteo\ emerg.} = \frac{9718667{,}82\,\frac{kJ}{h}}{1129\,\frac{kJ}{kg}} = 8608{,}21\,\frac{kg}{h}$$

Lo que en volumen representan: $8608{,}21\,\frac{kg}{h} \cdot \frac{1\,m^3}{792\,kg\,de\,met.} = 10{,}87\,\frac{m^3}{h}$

11.1.1.8 Cubeto de retención

Para el dimensionamiento del cubeto se han especificado sus diferentes parámetros empezando por la longitud de este. Para esto se necesita conocer la distancia mínima entre los tanques y con la pared del cubeto.

La distancia mínima entre los tanques se ha obtenido siguiendo lo estipulado en el reglamento de almacenamiento de productos químicos (RD 656 / 2017), donde para productos de clase B

como es el caso del metanol la distancia es:

$$D_{mín} = 0{,}5 \cdot D_{ext} = 0{,}5 \cdot 8{,}02\,m = 4{,}01\,m$$

En cuanto a la distancia con la pared del cubeto, se han seleccionado 1,5 m para poder cumplir con el apartado de la normativa (RD 656 / 2017) que indica que los tanques han de ser accesibles para la realización de inspecciones y tareas de mantenimiento.

Con estos valores se obtiene la longitud del cubeto de retención:

$$L_{cubeto} = N\,º_{tanques} \cdot D_{ext} + \left(N\,º_{tanques} - 1\right) \cdot D_{mín} + 2 \cdot D_{a\,cubeto}$$

Sustituyendo los valores:

$$L_{cubeto} = 4 \cdot 8{,}02\,m + (4-1) \cdot 4{,}01\,m + 2 \cdot 1{,}5\,m = 47{,}11\,m$$

Para la anchura del cubeto se ha calculado de la siguiente manera:

$$Anchura_{\,cubeto} = 2 \cdot D_{a\,cubeto} + D_{ext} = 2 \cdot 1{,}5\,m + 8{,}02\,m = 11{,}02\,m$$

Lo que proporciona la siguiente área:

$$Área_{\,cubeto} = L_{\,cubeto} \cdot Anchura_{\,cubeto} = 47{,}11\,m \cdot 11{,}02\,m = 519{,}14\,m^2$$

Área la cual parte de ella se encuentra ocupada por los tanques, así que restando esta área ocupada a la total del cubeto se ha obtenido la útil:

$$Área_{\,ocupada} = N\,º_{tanques} \cdot \left(\frac{\pi}{4} \cdot D^{\,2}_{ext}\right) = 4 \cdot \left(\frac{\pi}{4} \cdot (8{,}02\,m)^{\,2}\right) = 202{,}06\,m^2$$

$$Área_{\,útil} = Área_{\,cubeto} - Área_{\,ocupada} = (519{,}14 - 202{,}06)\,m^2 = 317{,}07\,m^2$$

A partir de este valor y aplicando la normativa (RD 656 / 2017), la cual indica que el cubeto ha de ser capaz de retener todo el volumen del tanque con más capacidad o en su defecto el 10 % del volumen total a almacenar, se puede obtener la altura de la pared del tanque de la siguiente forma teniendo en cuenta que se ha sobredimensionado por seguridad con 0,15 m:

$$H_{\,cubeto} = \frac{V}{Área_{\,útil}} + 0{,}15\,m = \frac{402{,}70\,m^3}{317{,}07\,m^2} + 0{,}15\,m = 1{,}42\,m$$

Con todo esto se obtiene por lo tanto un cubeto de retención del siguiente volumen:

$$V_{cubeto} = H_{\,cubeto} \cdot Área_{\,cubeto} = 1{,}42\,m \cdot 519{,}14\,m^2 = 737{,}20\,m^3$$

11.1.2 Diseño de los tanques de almacenamiento de formol al 37 %

Para el almacenamiento del formol se ha seguido el mismo procedimiento que con el metanol, los únicos cambios han sido los siguientes:

- Se ha decidido calorifugar los tanques con lana de roca como aislante térmico para mantener la temperatura del metanol en unos 25 ºC, temperatura óptima para la solución de formol al 37 % estabilizado con un 10 % de metanol. Esto es necesario porque si el producto baja de 15°C comenzaría a precipitar en forma de paraformaldehído (sólido), y si sube por encima de unos 35 ºC aumentaría la formación de ácido fórmico. Además, este calorifugado afecta en el cálculo el venteo de emergencia al permitir disminuir F a 0,3, el cual es un valor estándar para tanques con un calorifugado de lana de roca, lo que significa que el aislamiento reduce el calor absorbido en un 70%.

- Como el formaldehído es una sustancia tóxica, irritante, cancerígeno y mutagénico se ha decidido trabajar con presiones de nitrógeno ligeramente superiores (0,07 bares) para asegurar que ningún vapor escape a la atmósfera.

- Se ha decidido que la configuración de estos tanques sea de dos cabezales elipsoidales y un cuerpo cilíndrico.

Una vez expuesto esto se pueden presentar los valores calculados en este dimensionamiento los cuales son los que se pueden observar en la Tabla 11.1.1:

Tabla 11.1.1. Especificaciones de los tanques de formol al 37 %

Variable	Valor
Formol al 37 % a almacenar (m^3)	1982,30
Volumen de cada tanque (m^3)	564,96
Volumen ocupado por formol (m^3)	495,58
Diámetro interno (m)	8,43
Altura (m)	10,12
Altura máxima del formol (m)	8,88
Presión de diseño (bar)	1,18
Espesor del cuerpo cilíndrico (mm)	8
Espesor de los cabezales (mm)	8
Diámetro exterior (m)	8,45
Peso vacío (kg)	26932,41
Peso lleno (kg)	577021,80
Caudal de venteo de emergencia (m^3/h)	4
Longitud del cubeto (m)	42,79
Anchura del cubeto (m)	11,45
Altura del cubeto (m)	2,28
Volumen del cubeto (m^3)	1115,21

11.2 Diseño del reactor (R-201 y R-202)

11.2.1 Observaciones previas al diseño

11.2.1.1 Balance de materia

En primer lugar, se ha realizado el cálculo del balance de materia con el fin de definir las corrientes de los componentes que entran al reactor. Para que el balance de materia sea correcto se debe cumplir lo siguiente:

Entrada (E) + Generación (G) = Salida (S) + Acumulación (A)

El reactor de Formics opera en estado estacionario durante 330 días al año, por lo que podremos considerar como nulo el término de acumulación del balance, A=0. Lo que resulta en que se simplifica a una diferencia entre los flujos de entrada y salida debida al término de generación de la reacción.

Teniendo esto en cuenta, se pueden observar a continuación los corrientes de entrada y salida de este equipo.

Tabla 11.2.1 Corrientes de entrada y salida del reactor

	% molar en la entrada	Caudal de entrada (Kmol/min)	% molar en la salida	Caudal de salida (Kmol/min)
O_2	19,6	8,4	15,9	7
N_2	73,8	31,6	71,5	31,6
H_2O	—	—	6,2	2,7
MeOH	6,5	2,8	0,1	0,1
CH_2O	—	—	6,2	2,7

Como se puede observar en la Tabla 11.2.1, se tiene un caudal de formaldehído en la salida del reactor de 2,7 Kmol/min, lo que equivale al siguiente caudal másico:

$$2{,}744\frac{Kmol}{min}\cdot 30{,}03\frac{kg}{Kmol}\cdot\frac{1\,Tn}{10^3\,kg}\cdot\frac{60\,min}{1\,h}\cdot\frac{24\,h}{1d}\cdot\frac{330d}{1\,año}=39157{,}6\,Tn/año$$

Teniendo en cuenta que se ha marcado el objetivo de una producción final de 100000 Tn/año de formol al 37%, para la que se necesitan 37000 Tn/año, con la producción máxima actual de 39157,6 Tn/año se puede llegar a una producción de 105000 Tn/año, cumpliendo así lo previsto

y teniendo margen para poder abastecer a los clientes en caso de por ejemplo un aumento de la demanda.

11.2.1.2 Reactivos

Además, cabe destacar que la temperatura y presión de entrada al reactor son de 247 °C y 2 atm respectivamente.

Aparte de esto, hay más condiciones que se han tenido en cuenta las cuales han influido en cómo se encuentran los reactivos, estas son las siguientes:

- La reacción se da en exceso de aire ante el metanol en proporción 3:1, esto con el objetivo de evitar que se den mezclas explosivas. Ya que cabe recordar que el límite inferior de explosividad del metanol es del 4,4 % del volumen con aire.
- Considerando que se cumple la ley de Raoult y que no hay expansión de volumen, se asume que las presiones parciales se comportan como la cantidad de materia de una corriente gaseosa.

11.2.1.3 Catalizador

Se ha trabajado con un catalizador comercial sólido de óxidos metálicos, compuesto específicamente por Hierro y Molibdeno (Fe-Mo), provisto por la empresa Perstorp. El catalizador se presenta en forma de pellets cilíndricos huecos (anillos) de entre 2,4 y 2,8 mm de longitud y 4 mm de diámetro. A nivel industrial, este catalizador presenta un tiempo de vida útil estimado de entre uno y dos años, dependiendo de las condiciones de operación a las que se vea sometido.

Las características más importantes del catalizador, para realizar el diseño de los reactores y la evaluación cinética, se presentan en la siguiente tabla (Deshmuhk et al.2005):

Tabla 11.2.2 Propiedades del catalizador

Propiedades del catalizador (Fe-Mo)	Valor
Área superficial	6 m^2/g
Densidad	1500 kg/m3
Porosidad	0,55
Diámetro partícula	4 mm

Tal y como se puede ver en la Figura 11.2.1, los tubos que componen el reactor multitubular de lecho fijo presentan unas dimensiones de 1,5" (0,0381 m) como diámetro exterior, y un espesor de 0,002211 m, lo que da un diámetro interno de 0,00339 m. Y una longitud de 2 m, de los cuales habrá una zona de 0,075 m de longitud a la entrada y a la salida donde no habrá catalizador, solo inerte.

Los 1,85 m restantes del tubo están divididos en 3 segmentos con diferentes fracciones de catalizador. La primera parte, 37,5 cm la cual asegura que en la parte superior del tubo, donde hay mucho metanol, la reacción esté frenada debida a la baja concentración de catalizador 17,5%. En el segundo segmento, que consta de los siguientes 45 cm, se aumenta la densidad de catalizador hasta el 23%, y en el tercer segmento, que es el más largo, 67,5 cm, se aumenta la densidad hasta el 36%.

Gracias a segmentar la zona de reacción del tubo, en diferentes lechos fijos con este método de grading (Motahari et al. 2024), se evita que el calor generado supere los 610 K, debido a tener un pico de temperatura muy pronunciado 'hot spot' alto, protegiendo la capa de molibdeno superficial, evitando la degradación excesiva del catalizador, y asegurando que no se alcanzan temperaturas donde se puedan favorecer reacciones secundarias, como la que produce CO (Thrane et al. 2021).

11.2.2 Diseño del reactor

La masa de catalizador utilizada en este proceso es de 9000 kg, repartida entre el número de tubos. Se ha de tener en cuenta que de esos 9000 kg hay un porcentaje grande que es inerte, no son 9000 kg de catalizador puro, como bien se ha explicado anteriormente.

Para el desarrollo del proceso se ha seleccionado una configuración de dos reactores multitubulares de carcasa y tubos de 4000 tubos cada uno, operando en paralelo, en sustitución de una única unidad masiva de 8000 tubos. Esta decisión de diseño responde, principalmente, a criterios de viabilidad logística y limitaciones de fabricación mecánica. Un único reactor de 8000 tubos requeriría un diámetro de carcasa y un peso total en vacío que excedería los límites estándar tonelaje para el transporte por carretera, obligando a contratar transportes especiales de gran envergadura altamente costosos y condicionados por severas restricciones de ruta. La división en dos unidades modulares simplifica significativamente este problema. Adicionalmente, esta configuración en paralelo mejora la hidrodinámica del sistema al asegurar una distribución de flujo más homogénea en el cabezal de entrada de reactores de menor sección, y aporta una elevada flexibilidad operativa. Ante paradas programadas por mantenimiento, limpieza o sustitución del catalizador, es posible aislar uno de los equipos sin detener por completo la actividad de la planta, manteniendo la producción al 50% de su capacidad nominal. Por tanto, aunque la duplicidad de líneas incrementa levemente la inversión inicial (*CAPEX*), el balance global justifica la alternativa elegida por su seguridad logística, viabilidad de fabricación y robustez operativa (*OPEX*).

A partir de las tres ecuaciones diferenciales dX/dW, dP/dW y dT/dW, que se expresan en los siguientes apartados, se lleva a cabo la simulación y el diseño del reactor. Al ser un reactor

catalítico, tanto la presión, como la conversión y la temperatura varían a medida que van atravesando el lecho poroso, por eso las ecuaciones diferenciales dependen de la masa de catalizador W. Para simplificar el coste computacional y asumiendo una distribución uniforme, el modelo se resuelve para un único tubo.

11.2.2.1 Volumen

Con la masa del catalizador ya se puede calcular el volumen del lecho del reactor, sin tener en cuenta que hay 15 cm en cada tubo que no contienen catalizador; solo contienen inerte, que no se contabiliza en los 9000 kg de catalizador. Cada reactor tendrá 4500 kg de catalizador.

El volumen del lecho fijo del reactor se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$V = \frac{W}{\rho_{cat} \cdot (1 - \varepsilon)}$$

$$V = \frac{4500\ kg}{1500\ \frac{Kg}{m3} \cdot (1-0{,}55)} \qquad V = 6{,}67\ m^3$$

Donde:

- ρ_{cat}*: densidad del catalizador*
- ε*: porosidad del lecho fijo*
- W*: masa catalizador*

Siendo entonces 6,67 m^3 el volumen de lecho fijo de cada reactor. Y para obtener la conversión del reactor se utiliza la siguiente ecuación de diseño:

$$\frac{dX}{dW} = -\frac{rA}{Fae}$$

Mediante está se ha obtenido una conversión del reactor del 98%, tal y como se puede ver representado en la siguiente figura:

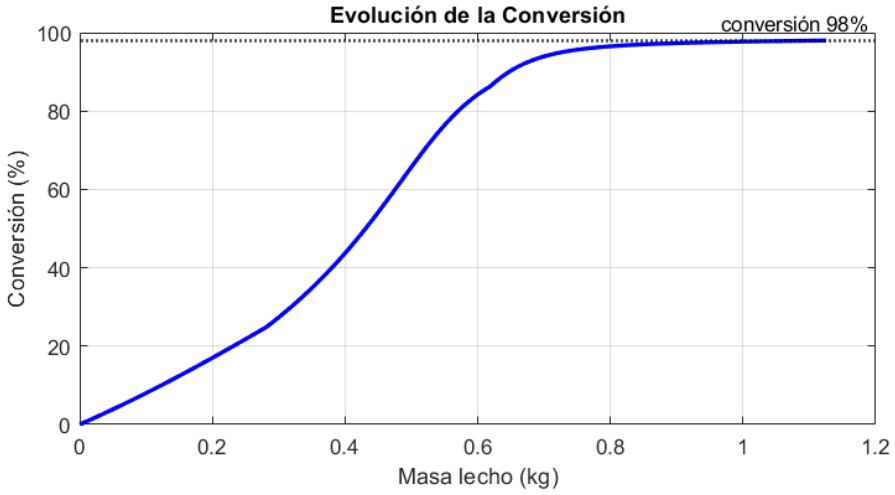


Figura 11.2.2 Gráfica Matlab: Conversión en función de la masa de catalizador

La velocidad de la reacción de oxidación del metanol en formaldehído se ve representada mediante la siguiente expresión (Deshmukh et al. 2005):

$$r_{HCHO} = k_{HCHO} \cdot \theta_{CH3OH} \cdot \theta_{O2}$$

Donde:

$$\theta_{CH3OH} = \frac{K_{CH3OH} \cdot P_{CH3OH}}{1+K_{CH3OH} \cdot P_{CH3OH} + K_{H2O} \cdot P_{H2O}} \qquad \theta_{O2} = \frac{K_{O2} \cdot P_{O2}^{1/2}}{1+K_{O2} \cdot P_{O2}^{1/2}}$$

Las constantes cinéticas se obtienen mediante la ecuación de Arrhenius, y estas, a su vez, variarán en función de la temperatura. Cada constante de la ecuación se obtiene a partir de la siguiente tabla (Deshmukh et al. 2005) :

Tabla 11.2.3 Valores ecuación de Arrhenius

Constantes	Valor Pre-exp.	Energía de activación (kJ/mol)
K_{CH3OH} (atm^{-1})	$2,6 \cdot 10^{-4}$	-56,78
K_{O2} ($atm^{-1/2}$)	$1,423 \cdot 10^{-5}$	-60,32
K_{H2O} (atm^{-1})	$5,5 \cdot 10^{-7}$	-86,45
k_{HCHO} ($mol\ kg^{-1}\ s^{-1}$)	$1,5 \cdot 10^{7}$	86,00

Con lo que se obtienen las siguientes expresiones:

$$K_{CH3OH} = 2,6 \cdot 10^{-4} \cdot exp\left(\frac{56780}{8,314 \cdot T\ (K)}\right)$$

$$K_{O2} = 1{,}423 \cdot 10^{-5} \cdot exp\left(\frac{60320}{8{,}314 \cdot T\,(K)}\right)$$

$$K_{H2O} = 5{,}5 \cdot 10^{-7} \cdot exp\left(\frac{86450}{8{,}314 \cdot T\,(K)}\right)$$

$$k_{HCHO} = 1{,}5 \cdot 10^{-7} \cdot exp\left(\frac{-86000}{8{,}314 \cdot T\,(K)}\right)$$

En cuanto a P_{CH3OH} , P_{H2O} y P_{O2} , estas representan las presiones parciales de cada componente. Y se obtienen a partir de los caudales molares de los componentes correspondientes según las siguiente fórmulas:

$$P_j = \left(\frac{n_j}{n_{totales}}\right) \cdot P_{total} \qquad n_j = n_{jo} - \left(\frac{\nu_j}{\nu_k}\right) \cdot X_k$$

Siguiendo esto mismo, una vez se obtienen todos los caudales molares, estos se suman y se obtiene la fracción molar para cada componente $\left(\frac{n_j}{n_{totales}}\right)$. Al multiplicar este valor por la presión total (la cual varía a lo largo del tubo) se obtienen las presiones parciales correspondientes a lo largo del tubo.

11.2.2.2 Balance de energía

La reacción de oxidación del metanol en formaldehído es una reacción muy exotérmica, por lo que se tendrá una generación de calor muy grande. Para que se pueda llevar a cabo esta reacción dentro del reactor de forma controlada y siguiendo las condiciones de operación establecidas, todo este calor generado deberá ser absorbido por un refrigerante. Para este reactor se hace uso del aceite térmico Dowtherm A, de la empresa Dow. Un fluido sintético orgánico de transferencia de calor diseñado para sistemas líquidos no presurizados que operan de forma óptima en el rango de -10 °C a 288 °C. Por lo que será un refrigerante ideal que permitirá trabajar a la carcasa a una baja presión, y dentro de los rangos de temperatura que trabaja el reactor. A diferencia del caso del agua, que si se quisiese utilizar como refrigerante, a pesar de tener una Cp mayor: 4,815 Kj/Kg·K frente a los 2 Kj/Kg·K del aceite térmico, para poder trabajar con agua se tendría que mantener una presión muy elevada en la carcasa, lo que no compensa el ahorro en la cantidad de refrigerante.

A continuación, se encuentra la ecuación del balance de energía, la cual permite el cálculo del perfil de temperatura del gas a lo largo de la masa del catalizador, teniendo en cuenta las pérdidas de calor:

$$\frac{dT}{dW} = \frac{\frac{-rA}{vA} \cdot \Delta Hr - U \cdot a \cdot (T - Ta)}{Fae \cdot \left(\sum \frac{Fie}{Fae} \cdot Cpi + \Delta Cp \cdot X\right) \cdot \rho_{lecho}}$$

Donde:

- T: Temperatura de la mezcla gaseosa reactiva (K).
- W: Masa de catalizador en el lecho (kg).
- rA: Velocidad de reacción referida a la masa de catalizador (kmol / kg cat · h).
- vA: Coeficiente estequiométrico del reactivo A (adimensional).
- ΔHr: Entalpía o calor de reacción (kJ / kmol).
- U: Coeficiente global de transferencia de calor (W/ m² · ºC).
- a: Área de transferencia de calor por unidad de volumen de tubo (m² / m³)
- Ta: Temperatura del fluido refrigerante (K).
- Fae: Caudal molar inicial del reactivo A (kmol / h).
- Fie: Caudal molar inicial de cada componente "i" (kmol / h).
- Cpi: Capacidad calorífica molar del componente "i" (kJ / kmol · K).
- ΔCp: Variación de la capacidad calorífica con la reacción (kJ / kmol · K).
- X: Conversión del reactivo A (adimensional).
- ρ_{lecho}: Densidad aparente del lecho catalítico (kg / m³).

En cuanto al líquido refrigerante, la ecuación utilizada ha sido la siguiente:

$$\frac{dT}{dW} = \frac{U \cdot a \cdot (T - Ta)}{m_{ref} \cdot Cp_{ref} \cdot \rho_{lecho}}$$

Donde:

- Ta: Temperatura del fluido refrigerante (K).
- W: Masa de catalizador acumulada en el tramo del reactor (kg).
- U: Coeficiente global de transferencia de calor (kJ / h · m² · K).
- a: Área de transferencia específica del tubo (m² / m³).
- T: Temperatura del gas dentro de los tubos (K).
- m_{ref}: Caudal másico de refrigerante por cada tubo (kg / h).
- Cp_{ref} : Capacidad calorífica del líquido refrigerante (kJ / kg · K).
- ρ_{lecho}: Densidad aparente del lecho catalítico (kg / m³).

En la siguiente figura se ven representados los dos perfiles de temperatura, tanto del líquido refrigerante a lo largo del reactor como de los gases que reaccionan dentro de los tubos a lo largo del lecho fijo:

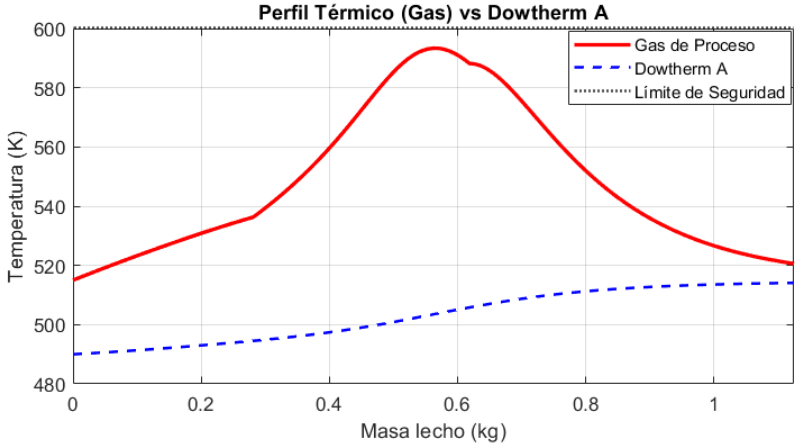


Figura 11.2.3 Gráfica Matlab: Perfiles de temperatura

En esta figura, se observa como en el perfil de temperatura de los gases (la roja), se ven perfectamente diferenciadas las 3 zonas del gradiente de catalizador dentro del tubo, dejando un pico no muy pronunciado entre cada una de las zonas.

Y para llegar al valor del caudal de refrigerante necesario, se utiliza el valor del calor generado en la reacción el cual se calcula de la siguiente forma:

$$Q_{generada} = F_{form} \cdot \Delta H_{reacción}$$

$$Q_{generada} = 2800\ \frac{mol}{min} \cdot (-158{,}8\ \frac{Kj}{mol}) = -444640\ \frac{Kj}{min}$$

$$444640\ \frac{Kj}{min} \cdot \frac{1\ min}{60\ s} = 7401{,}67\ \frac{Kj}{s}$$

Y a partir de este valor se obtiene ms (el caudal másico de refrigerante) de la siguiente manera:

$$ms = \frac{Q_{generada}}{\Delta T\ \cdot\ Cp}$$

Donde:

- ΔT: Variación temperatura del líquido refrigerante
- Cp: Calor específico del líquido refrigerante

- $Q_{generada}$: Calor generado en el reactor

Por lo que sustituyendo se obtiene:

$$ms = \frac{7401{,}6\,\frac{Kj}{s}}{25\,K \cdot 2\,\frac{Kj}{Kg \cdot K}} \qquad ms = 148\,\frac{Kg}{s}$$

Quedando así, un caudal requerido de 148 kg/s de aceite térmico con el fin de absorber todo el calor generado e igualarlo a 0.

11.2.2.3 Pérdida de presión

Para evaluar la pérdida de carga (presión) del gas a medida que atraviesa el lecho poroso, se emplea la Ecuación de Ergun:

$$\frac{dP}{dW} = \frac{\alpha}{2} \cdot \left(\frac{Pe}{\frac{P}{Pe}} \right) \cdot (1 - \varepsilon \cdot X)$$

Para el cálculo de alfa se utiliza beta, los cuales agrupan los términos viscosos y cinéticos de la fricción fluido-partícula, adaptándose para que la derivada de la presión respecto a la masa de catalizador pueda integrarse de forma continua.

En concreto alfa se calcula de la siguiente forma:

$$\alpha = \frac{2 \cdot \beta}{A \cdot \rho_{cat} \cdot (1 - \varepsilon) \cdot Pe}$$

Donde:

- *El parámetro alfa no es constante y variará en función de la variable beta*
- *A (área de paso) = 9,0152* $\cdot 10^{-4}$ *m²*
- ρ_{cat} *(densidad de catalizador) = 1500 kg/m³*
- *ε (porosidad) = 0.55*

Y para el cálculo del valor de beta:

$$\beta = \frac{G \cdot (1 - \varepsilon)}{D_{part} \cdot \rho \cdot \varepsilon^3} \cdot \left(\frac{150 \cdot (1 - \varepsilon) \cdot \mu}{D_{part}} + 1{,}75 \cdot G \right)$$

Donde:

- □ (densidad de la mezcla) = 0,9351 kg/m^3
- D_{part} (diámetro de la partícula) = 0,004 m
- □ (viscosidad de la mezcla) = 2,7778 · 10^{-5} kg/m·s
- G (densidad de flujo másico): Se calcula dividiendo el flujo másico total por el área de paso = 2,1590 kg/m^2·s

Una vez se simula el proceso en MATLAB, se acaba obteniendo una presión final de 1,79 atm respecto a las 2 atm de entrada, lo que supone una caída de presión de P = 2 - 1,79 = 0,21 atm, como se ve representado en la siguiente figura:

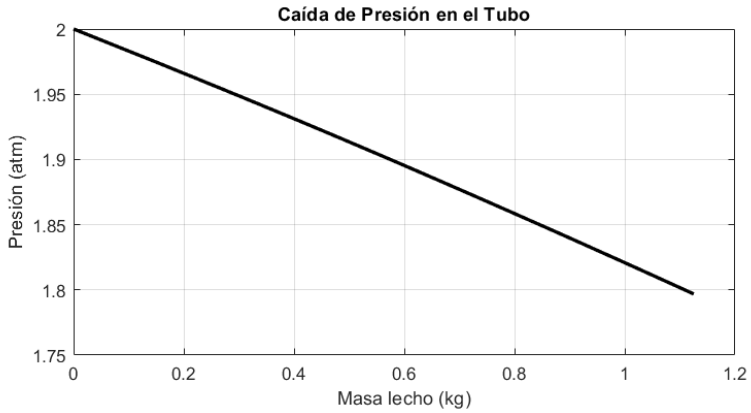


Figura 11.2.4 Gráfica Matlab: Pérdida de Carga en el lado de tubos

11.2.2.4 Características del lado de tubos

Tabla 11.2.4 Dimensionamiento de tubos

Dimensiones del tubo	Valor
Longitud	2 m
Diámetro externo	0,0381 m (1,5”)
Espesor	0,00211 m
Diámetro interno	0,03388 m

El diseño se basa en dos reactores multitubulares compuestos por 4000 tubos cada uno, los cuales utilizan un catalizador de hierro-molibdeno. Se hará uso de acero inoxidable AISI 316L, el cual ofrece protección contra la corrosión, debida a la posible aparición de ácidos, como el fórmico, mediante la mezcla de agua condensada por algún factor y formaldehído.

El cálculo para el diseño del número de tubos se ha llevado a cabo con las ecuaciones que se mostrarán seguidamente. Se ha de tener en cuenta que con este cálculo, no se tienen presentes los picos de temperatura que se producen a lo largo del reactor. Y aunque se realizase con la

diferencia de temperatura media logarítmica, se obtendrían valores inferiores de diferencia, que no son fieles a la realidad, puesto que a la salida el incremento de temperatura es aún menor, lo que alejaría los resultados aún más. Al tener en la simulación una diferencia de temperatura entre el líquido refrigerante y el de los tubos mucho mayor, se necesita menos área de intercambio (menos tubos).

Por lo que para este caso se ha llevado a cabo el cálculo con la variación de temperaturas a la entrada como aproximación.

Además, para hacer la aproximación del número de tubos necesario, se han tenido en cuenta: el calor generado, el área de intercambio necesaria y el área de cada tubo; calculados a continuación:

$$A = \frac{Q_{generada}}{U \cdot (T - Tr)}$$

$$A = \frac{7401666{,}67\ \frac{J}{s}}{100\ \frac{J}{s \cdot m^2 \cdot K} \cdot (515 - 490)} \qquad A = 1881\ m^2$$

$$A_{tubo} = \pi \cdot L \cdot D_{ext}$$

$$A_{tubo} = \pi \cdot 2\ m \cdot 0{,}0381\ m \qquad A_{tubo} = 0{,}24\ m^2$$

Una vez determinado el valor del área de intercambio necesaria y el área que proporciona cada tubo, se puede hacer la estimación sobre el número de tubos necesarios:

$$N_{tubos} = \frac{A}{A_{tubo}}$$

$$N_{tubos} = \frac{1881\ m^2}{0{,}24\ m^2} \qquad N_{tubos} = 7850 \approx 8000\ tubos$$

En el diseño final, simulado en Matlab, se utilizaron 8000 tubos, distribuidos en 2 reactores RCFP en paralelo, 4000 tubos en cada uno.

Con el fin de evaluar si las dimensiones de los tubos son adecuadas, se calcula la velocidad que tienen los gases dentro de los tubos, y se compara si se encuentra dentro de los rangos típicos:

$$v_t = \frac{m_t}{\rho_{fluido} \cdot A_{paso\ 1\ tubo} \cdot N_{tp}}$$

$$v_t = \frac{20{,}72\,\frac{kg}{s}}{0{,}94\,\frac{kg}{m^3}\cdot 9{,}01\cdot 10^{-4}\cdot 8000} \qquad v_t = 3\ \frac{m}{s}$$

Donde:

- v_t (velocidad en los tubos (m/s))
- m_t (caudal másico del fluido a los tubos)
- ρ_{fluido} (densidad del fluido)
- N_{tp} (número de tubos por cada paso):

Y el valor del área de paso de un tubo:

$$A_{paso\ 1\ tubo} = \frac{\pi}{4}\cdot (D_{int})^2$$

$$A_{paso\ 1\ tubo} = \frac{\pi}{4}\cdot (0{,}03388)^2 A_{paso\ 1\ tubo} = 9{,}01\cdot 10^{-4} m$$

Y comparando el valor de la velocidad de los gases con un rango típico (de 1 a 3 m/s) se observa que es totalmente posible, aunque un poco alta pero este valor esta totalmente justificado. Como indican Green y Southard (2019), la velocidad del gas debe ser suficientemente alta para mantener un régimen turbulento. Esto reduce el grosor de la película estancada alrededor de la pastilla de catalizador, eliminando la resistencia a la transferencia de materia. Si vas lento, el gas "no entra" bien al catalizador. Por eso se buscan velocidades altas como en este caso.

Una vez determinada la velocidad del fluido, se puede calcular el diámetro de la carcasa. Este se obtiene mediante el conocimiento del número de tubos, del diámetro del conjunto de los tubos, del número de pasos por tubos y del pitch (la distribución de los tubos).

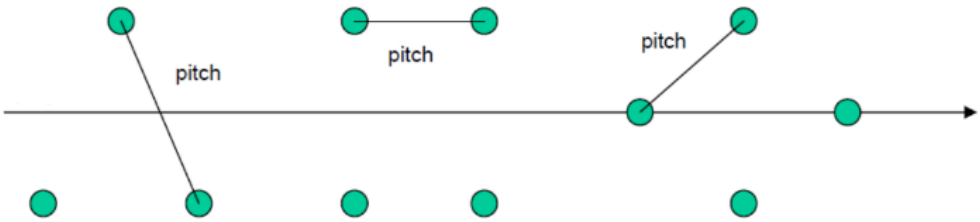


Figura 11.2.5 Representación del pitch

El pitch es la distancia entre el centro de dos tubos consecutivos. Para seleccionar un pitch u otro, es importante saber que el triangular y el romboidal proporcionan una alta transferencia de calor, pero la pérdida de presión es mayor. Por eso, se ha preferido instalar un pitch triangular, el cual es de:

$$pitch = 1{,}25\ \cdot\ Dext$$

$$pitch = 1{,}25 \cdot 0{,}0381\ m \qquad pitch = 0{,}047\ m$$

Como último parámetro a determinar en el diseño del sistema de refrigeración del reactor, se ha calculado cuántas pantallas deflectoras tendrá y cuál será la separación entre ellas.

Existen dos parámetros que determinan las características geométricas de las pantallas deflectoras. Por un lado, se tiene en cuenta que la altura libre de la pantalla '*baffle cut'* es el espacio entre la pantalla y la carcasa. Este se representa como un porcentaje que oscila entre el 15 y el 45 % del diámetro de la carcasa, estando comprendidos los valores óptimos entre el 20 y 25 %.

Por otro lado, el espaciado entre pantallas, que oscila entre 0,2 y 1 veces el diámetro de la carcasa, siendo el rango óptimo entre 0,3 y 0,5 veces dicho diámetro.

Hay que tener en presente que estos valores óptimos están pensados para intercambiadores de carcasa y tubos, donde la longitud es mucho mayor que el ancho. En este caso el diseño del reactor es tipo 'pancake-shaped reactors', el ancho del reactor 3,2 m es mayor que su longitud de 2 m, por lo que los valores típicos y óptimos no tienen porque ser los mejores paar este caso.

Como se ha comentado en anteriores apartados, la reacción es muy exotérmico por lo que con el fin de evitar puntos calientes muy altos, se utilizará para el espacio entre pantallas un valor un poco inferior al 20 % aproximadamente, puesto que de esta manera se puede sacar mayor provecho de la corta longitud de los tubos del reactor, y un 25 % aproximadamente de 'baffle cut', siendo este un valor típico que también ayudará a sacar mayor partido a la longitud. Quedando así la siguiente ecuación:

$$B = \frac{2\ m}{4\ secciones} = 0{,}5\ m$$

$$Baffle\ cut = 0{,}25 \cdot 3{,}2\ m = 0{,}8\ m$$

Con esta configuración en las pantallas deflectoras del reactor, se tendrán 3 pantallas deflectoras cada 0,5 m, lo que evitará vibraciones, y el aceite térmico refrigerante pasará 4 veces por el haz de tubos evitando la formación de zonas calientes estancadas.

11.2.2.5 Características del lado de la carcasa

Con el pitch seleccionado, se puede calcular el diámetro del conjunto de tubos mediante la ecuación siguiente, teniendo en cuenta que estos se dividirán en 2 reactores:

$$Ds = D_{ext} \cdot \left(\frac{N_{tubos}}{K1}\right)^{\frac{1}{n1}}$$

Donde los valores en la ecuación son los siguientes:

n1 y K1 (constantes en función del pitch y el número de pasos por tubo): Para los intercambiadores con pitch triangular y 1 pasos por tubo n1 = 2,142 y K1 = 0,319

$$Ds = 0{,}0381 \cdot \left(\frac{4000}{0{,}319}\right)^{\frac{1}{2{,}142}} \qquad Ds = 3{,}12\ m$$

Para obtener el diámetro de la carcasa de los reactores, primero se debe determinar el tipo de cabezal del intercambiador que se desea diseñar. Este, se podrá conocer a partir de la gráfica siguiente. Importante tener en cuenta que en este caso, el cabezal que se usará es de tipo P *Outside Packed Heads*.

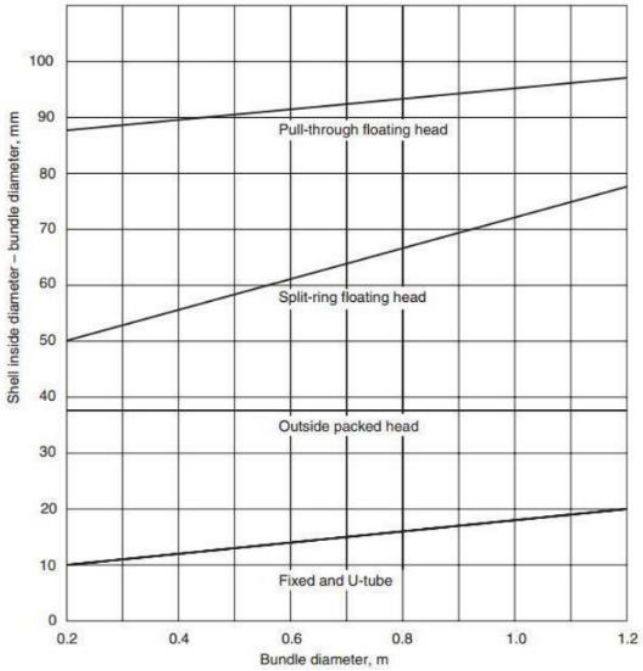


Figura 11.2.6 Tipos de cabezal de intercambiador

Cabe recalcar que en este caso se ha considerado que la mejor opción es esta, debido a la presencia de picos de temperatura que llegan hasta los 590 K, por lo que es imprescindible permitir la dilatación longitudinal del haz de tubos, con el fin de poder evitar fallos por fatiga térmica. Asimismo, el tipo de sellado externo facilita la inspección visual de fugas del aceite térmico; esto es posible gracias a que el Dowtherm A trabaja por la carcasa a bajas presiones.

Finalmente, teniendo en cuenta el diámetro de la carcasa de los reactores que suponen un aumento de 38 mm, se obtienen los siguientes valores:

$$Ds = 3{,}12\ m + 0{,}038\ m = 3{,}158\ m$$

Para el diseño se ha utilizado un valor de 3,2 m de diámetro interno de carcasa puesto que es un valor estándar que reducirá costes y facilitará la construcción de la carcasa.

Y una vez diseñadas las dimensiones de la carcasa, se procederá a calcular el valor de la velocidad del fluido de la carcasa, con el fin de estimar si se encuentra dentro de un rango de valores típicos. La ecuación es la siguiente:

$$v_s = \frac{m_s}{A_{st} \cdot \rho_s}$$

Donde A_{st} (área transversal de la carcasa) se calcula como:

$$A_{st} = \frac{Ib \cdot Ds \cdot (pitch - D_{ext})}{pitch \cdot N_{ps}}$$

Donde:

- Ib : Espacio entre pantallas
- N_{ps}: Número de pasos por carcasa
- D_{ext}: Diámetro exterior de tubos

$$A_{st} = \frac{0{,}5\ m \cdot 3{,}2\ m \cdot (0{,}047\ m - 0{,}0381\ m)}{0{,}047\ m \cdot 1} \qquad Ast = 0{,}3\ m^2$$

Como el calor generado total se genera entre los dos reactores, se divide el caudal refrigerante entre dos también. Y con esto ya se puede calcular la velocidad del líquido refrigerante:

$$v_s = \frac{74\ \frac{Kg}{s}}{0{,}3\ m^2 \cdot 884\ \frac{Kg}{m^3}} \qquad v_s = 0{,}28\ \frac{m}{s}$$

El valor de la velocidad se sitúa un poco por debajo de los rangos típicos de velocidades de líquidos en intercambiadores de carcasa y tubos en el lado de la carcasa. Pero al ser un reactor que se rige por la cinética y termodinámica, no por la eficiencia máxima en la transferencia de calor estamos dentro de rangos típicos para líquidos viscosos que circulan por el lado de carcasa (Green & Southard, 2019), siendo el rango de velocidades 0.1-0.5 m/s.

Se comprueba también la pérdida de presión:

$$Re = \frac{D_{eq} \cdot G_s}{\mu}$$

Calculando el diámetro equivalente como:

$$D_{eq} = \frac{1{,}1}{D_{ext}} \cdot (pitch^2 - 0{,}917 \cdot D_{ext}^2)$$

$$D_{eq} = \frac{1,1}{0,0381} \cdot (0,047^2 - 0,917 \cdot 0,0381^2) \qquad D_{eq} = 0,025$$

Y el caudal másico por unidad de área, es el siguiente:

$$G_s = \frac{m_s}{A_{st}}$$

$$G_s = \frac{74 \frac{Kg}{s}}{0,3\ m^2} \qquad G_s = 246,67 \frac{Kg}{s \cdot m^2}$$

Con estos dos valores ya se puede calcular el Reynolds, y con él, el factor de fricción, para finalmente obtener la pérdida de presión de la carcasa.

$$Re = \frac{0,025\ m \cdot 246,67 \frac{Kg}{s}}{0,39 \cdot 10^{-3} \frac{kg}{m \cdot s}} \qquad Re = 15812,18$$

Mediante el número de Reynolds, la siguiente gráfica y el porcentaje de '*baffle cut*' (25%), se deduce el valor del factor de fricción:

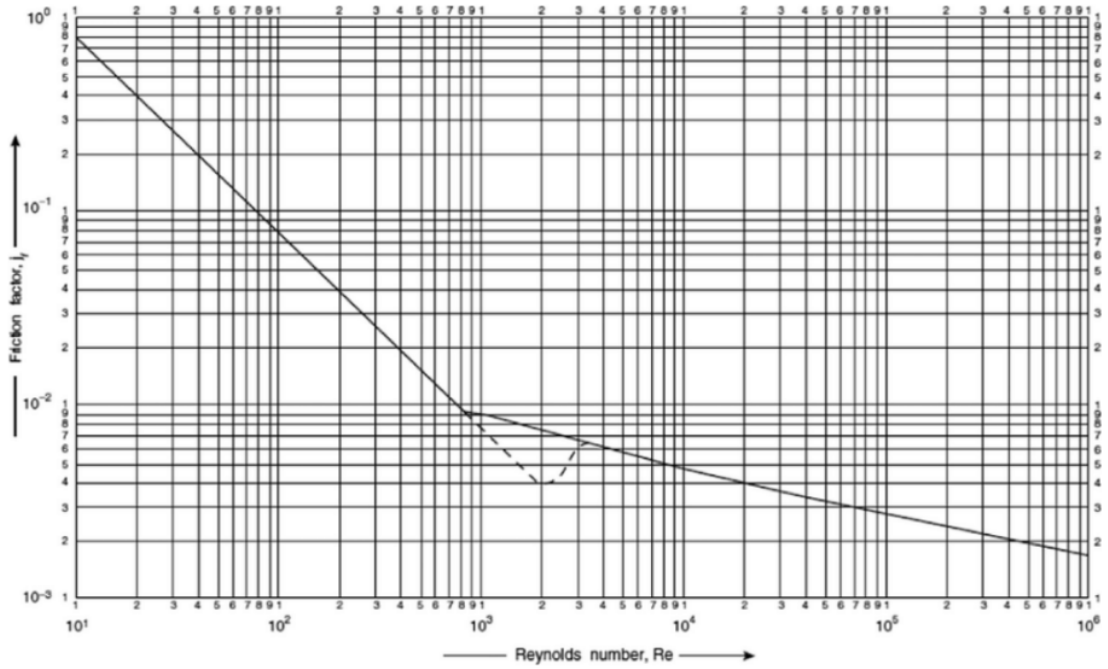


Figura 11.2.7 Correlación entre Reynolds y factor de fricción

Se ha obtenido un factor de fricción de: $fr = 3,9 \cdot 10^{-3}$

Y finalmente con este factor se puede obtener la pérdida de carga del lado de la carcasa.

$$\Delta P_s = n_s \cdot 8 \cdot j_f \cdot \frac{\rho \cdot v_t^2}{2} \cdot \left(\frac{D_s}{D_{eq}}\right) \cdot \left(\frac{L}{Ib}\right)$$

$$\Delta P_s = 1 \cdot 8 \cdot 3{,}9 \cdot 10^{-3} \cdot \frac{884 \cdot 0{,}28^2}{2} \cdot \left(\frac{3{,}2}{0{,}025}\right) \cdot \left(\frac{2}{0{,}5}\right)$$

$$\Delta P_s = 554 \frac{N}{m^2} = 5{,}54 \cdot 10^{-3} bar$$

La velocidad del fluido en la carcasa es baja, entonces esto implica una menor pérdida de presión, lo que se suma a la corta longitud de los tubos. A la vez, esta pérdida de presión calculada no se suma a otra, como pasa en el lado de tubos con la ecuación de Ergun, donde también se tiene en cuenta la pérdida de presión por el lecho poroso.

11.2.2.6 Dimensiones

Como material estructural para la carcasa del reactor se ha seleccionado el acero inoxidable austenítico de bajo contenido en carbono AISI 316L. Si bien el acero al carbono de grado de recipiente de presión es una opción común en cambiadores de calor convencionales por su menor coste inicial, la elección de una aleación de alta especificación para la carcasa de este reactor se justifica plenamente bajo criterios de minimización de riesgos, integridad mecánica y estabilidad térmica a largo plazo:

Para llevar a cabo el cálculo del grosor de la carcasa se hará uso de las fórmulas del código A.S.M.E *(American Society of Mechanical Engineers)*, para calderas y recipientes a presión, como se observa en la siguiente figura:

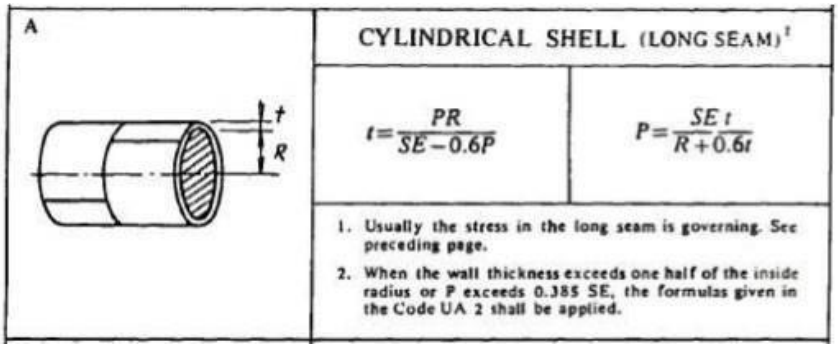


Figura 11.2.8 Fórmulas del código A.S.M.E

$$t = \frac{Pc \cdot R_i}{S \cdot E - 0{,}6 \cdot P} + C1$$

$$t = \frac{3{,}95\ atm \cdot 1600\ mm}{1289\ atm \cdot 0{,}85 - 0{,}6 \cdot 3{,}95\ atm} + 1{,}5\ mm$$

$$t = 7{,}28\ mm \approx 10\ mm$$

Donde:

- Pc : Presión de operación en la carcasa (atm)

- S: Esfuerzo del material (atm)
- E: Factor de eficacia de soldadura (normalmente para este material se usa 0,85)
- R_i: Radio interno de la carcasa (mm)
- $C1$: Constante de resistencia a la corrosión (suele ser de 0,1 mm/año)

Como la parte de la carcasa trabajará a 3,5 bar, se ha tenido en cuenta para el diseño del grosor un % extra por seguridad, 4 bar.

Una vez obtenido el espesor mínimo que deberá de tener el reactor, se puede terminar de definir las dimensiones de la carcasa:

$$D_{ext} = D_{int} + 2 \cdot espesor$$

$$D_{ext} = 3{,}2\ m + 2 \cdot 0{,}01\ m = 3{,}22\ m$$

Siendo entonces 3,22 metros el diámetro externo de la carcasa del reactor.

Para el cálculo de la altura final del reactor se tendrán en cuenta los 2 m de longitud de los tubos, y las dimensiones de la tapa, la cual es Elíptica 2:1, un estándar de la industria. Se ha optado por una tapa elíptica 2:1 por su eficiente geometría según el código ASME, ya que minimiza las concentraciones de esfuerzos y optimiza el espesor de pared necesario, asegurando la integridad mecánica del equipo.

Se ha seleccionado un cabezal elíptico con relación 2:1. Esta geometría se ha definido conforme a los estándares comerciales de recipientes a presión, donde la altura total del cabezal (H) se establece como (D/4).

- Diámetro interno (D): 3200 mm
- Altura del cabezal (H): Se calcula como:

$$H = \frac{3200\ mm}{4} = 800\ mm$$

Por tanto, la tapa será un "domo" que sobresale 800 mm respecto al plano de la brida de la carcasa y aunque la forma es fija, el espesor debe calcularse para resistir la presión. Como ya se ha hecho antes para calcular el grosor de la carcasa, se utiliza esta fórmula del código ASME pero de una sección específica para cabezales:

$$t = \frac{Pc \cdot D}{2 \cdot S \cdot E - 0{,}2 \cdot Pc} + C1$$

$$t = \frac{2{,}5\ atm \cdot 3200\ mm}{2 \cdot 1289\ atm \cdot 0{,}85 - 0{,}2 \cdot 2{,}5\ atm} + 1{,}5\ mm$$

$$t = 5{,}15\ mm\ \approx\ 6{,}35\ mm = 1/4"$$

- P: presión del lado de tubos
- D: diámetro de la carcasa
- S: Esfuerzo admisible del 316L (~1289 atm, o su equivalente en MPa/psi según tus tablas).
- E: 0.85 (Eficiencia de junta).
- C1: 1.5 mm (margen de corrosión).

Se utiliza una presión de diseño de 2,5 atm, a pesar de que la presión del lado de tubos es de 2 atm, para dar un margen de seguridad al diseño del grosor de la tapa.

Una vez calculado esto nos quedaría una altura total del reactor de:

$$Htot = Ltubos + 2 * Ltapa + 2 * Axtapa$$

$$Htot = 2m + 2 * 0{,}8\ m + 2 * 0{,}00635\ m$$

$$Htot = 3{,}6127\ m\ \approx\ 3{,}62\ m$$

Siendo finalmente estas las dimensiones de cada uno de los dos reactores:

Especificaciones del reactor	Valor
Longitud total	3,62 m
Diámetro interno	3,2
Espesor carcasa	0,01 m
Diámetro externo	3,22 m
Número de tubos	4000
Volumen del lecho	6,67 m^3
Volumen cabezal (cada tapa)	4,62 m^3
Volumen carcasa	16,1 m^3

11.2.3 Código Matlab

El código se ha diseñado como si fuese un solo reactor, por cuestiones de simplificación para simularlo, pero como se ha explicado en los anteriores apartados, se ha dividido en 2 reactores en paralelo.

===== DISEÑO REACTOR FORMOX INDUSTRIAL (REFRIGERANTE: DOWTHERM A) =======

```
function reactor_formox_catalizador_oxido_metalico
Te = 515;           % Temp entrada gas (K)
Trefin = 490;       % Temp entrada Dowtherm A (K) (~217 °C)
Ntubs = 8000;

% --- CAUDALES POR TUBO (kmol/h) ---
Fte = 168.023/Ntubs;
FO2e = 504.069/Ntubs;
FN2e = 1896.262/Ntubs;
mref = 3006/Ntubs;       % Caudal molar de Dowtherm A por tubo (kmol/h)
(3006 kmol/h total / 8000)

% --- PARÁMETROS FÍSICOS Y GEOMÉTRICOS ---
porositat = 0.55;
denspart = 1500;
densllit = denspart * (1 - porositat);
d_ext = 0.0381;
espesor = 0.00211;
diamtub = d_ext - 2 * espesor;
areapas = (pi/4) * diamtub^2;

% --- TRANSFERENCIA DE CALOR ---
U_h = 100 * 3.6;             % Coeficiente global (kJ/h·m2·K)
atransf = 4/diamtub;         % Área superficial específica (m2/m3 tubo)

% --- CAÍDA DE PRESIÓN (ERGUN) ---
G = (70890 / 3600) / (Ntubs * areapas);
viscgas = 0.1 / 3600;
densentr = 0.9351;
dpart = 0.004;
Pe = 2; % atm
beta = ((G / (densentr * dpart)) * ((1 - porositat) / porositat^3) * ...
       (((150 * (1 - porositat) * viscgas) / dpart) + 1.75 * G)) / 101325;
alfa = (2 * beta) / (areapas * (1 - porositat) * denspart * Pe);

% --- TERMODINÁMICA --- (Unidades: kJ/kmol·K)
entalp = -158.8 * 1000;      % Calor de reacción (Exotérmica)
Cp_met = 65.71;
Cp_O2 = 32.06;
Cp_N2 = 30.1;
Cp_form = 48.64;
Cp_aigua570 = 36.1;          % Cp vapor de agua (producto en tubos)
Cp_refrig = 354.5;           % Cp molar Dowtherm A (refrigerante líquido)

% --- RESOLUCIÓN DEL SISTEMA ---
w_final = 9000 / Ntubs;      % Masa de catalizador por tubo (kg)
```

```
wcat_span = [0 w_final];
IC = [Te Trefin 0 Pe];       % Condiciones iniciales: [Tgas Trefrig X P]
options = odeset('RelTol', 1e-6, 'AbsTol', 1e-8);
[w, var] = ode15s(@funreact, wcat_span, IC, options);

%========== POST-PROCESADO ==========
T_res = var(:,1);            % Temp Gas (K)
Tr_res = var(:,2);           % Temp Refrigerante (K)
x_res = var(:,3);            % Conversión
P_res = var(:,4);            % Presión (atm)
nA = Fte * (1 - x_res);
nC = Fte * x_res;

%========== GENERACIÓN DE GRÁFICOS ==========
figure('Name', 'Simulación FORMOX - Refrigerante Dowtherm A', 'Color', 'w')
subplot(2,2,1)
plot(w, T_res, 'r', 'LineWidth', 2); hold on;
plot(w, Tr_res, 'b--', 'LineWidth', 1.5);
yline(600, 'k:', 'Límite 600K', 'LineWidth', 1.5);
ylabel('Temperatura (K)'); xlabel('Masa lecho (kg)'); grid on;
title('Perfil Térmico (Gas vs Dowtherm)');
legend('Gas de Proceso', 'Dowtherm A', 'Límite de Seguridad', 'Location',
'best');

subplot(2,2,2)
plot(w, x_res*100, 'b', 'LineWidth', 2);
ylabel('Conversión (%)'); xlabel('Masa lecho (kg)'); grid on;
title('Evolución de la Conversión');

subplot(2,2,3)
plot(w, P_res, 'k', 'LineWidth', 2);
ylabel('Presión (atm)'); xlabel('Masa lecho (kg)'); grid on;
title('Caída de Presión en el Tubo');

subplot(2,2,4)
plot(w, nA, 'm', 'LineWidth', 2); hold on;
plot(w, nC, 'Color', [0.85 0.33 0.1], 'LineWidth', 2);
ylabel('Caudal (kmol/h)'); xlabel('Masa lecho (kg)'); grid on;
title('Perfiles de Componentes');
legend('Metanol', 'Formaldehído', 'Location', 'best');

%========== FUNCIÓN DE DERIVADAS ==========
    function dvardw = funreact(w_loc, var_loc)
        T = var_loc(1);
        Tr = var_loc(2);
        x = var_loc(3);
        P = max(var_loc(4), 0.01);

        % --- ESTRATEGIA DE GRADING (3 etapas) ---

        if w_loc < (w_final * 0.25)
            frac_cat_local = 0.175;
        elseif w_loc < (w_final * 0.55)
            frac_cat_local = 0.23;
```

```
        else
            frac_cat_local = 0.3615;
        end

        nA_l = Fte * (1 - x);
        nB_l = FO2e - 0.5 * Fte * x;
        nC_l = Fte * x;
        nD_l = Fte * x;
        ntot_l = nA_l + nB_l + nC_l + nD_l + FN2e;

        Pa = (nA_l / ntot_l) * P;
        Pb = (nB_l / ntot_l) * P;
        Pd = (nD_l / ntot_l) * P;

        % Cinética de reacción
        KadA = 2.6e-4 * exp(56780 / (8.314 * T));
        KadB = 1.423e-5 * exp(60320 / (8.314 * T));
        KadD = 5.5e-7 * exp(86450 / (8.314 * T));
        kHCHO = 1.5e7 * exp(-86000 / (8.314 * T));

        thetaA = (KadA * Pa) / (1 + KadA * Pa + KadD * Pd);
        thetaB = (KadB * Pb^0.5) / (1 + KadB * Pb^0.5);

        R1 = (frac_cat_local * kHCHO * thetaA * thetaB) * 3.6;

        dvardw = zeros(4,1);
        dvardw(3) = R1 / Fte; % dX/dw

        % Balance de energía
        SumFiCpi = (nB_l/Fte)*Cp_O2 + (FN2e/Fte)*Cp_N2 + (nA_l/Fte)*Cp_met +
(nC_l/Fte)*Cp_form + (nD_l/Fte)*Cp_aigua570;
        Q_trans = (U_h * atransf * (T - Tr)) / densllit;

        dvardw(1) = ((R1 * (-entalp)) - Q_trans) / (Fte * SumFiCpi); % dT/dw
        dvardw(2) = Q_trans / (mref * Cp_refrig);                    %
dTr/dw (Calor sensible)
        dvardw(4) = (-alfa / 2) * (Pe / (P / Pe)) * (1 + 0.032 * x); % dP/dw
(Ajustado factor de expansión)
    end

 % --- RESULTADOS EN CONSOLA ---
 Volum_reactor_tubo = w_final/((1-porositat)*denspart);
 Long_tubo=(Volum_reactor_tubo/((pi/4)*diamtub^2));
 fprintf('\n--- RESULTADOS DEL DISEÑO (REFRIGERANTE ACEITE TÉRMICO) ---\n');
 fprintf('Conversión Final: %.2f%%\n', x_res(end)*100);
 fprintf('Temperatura Máxima Gas (Hot Spot): %.2f K\n', max(T_res));
 fprintf('Temperatura Final Dowtherm A: %.2f K (Delta T: %.2f K)\n',
Tr_res(end), Tr_res(end)-Trefin);
 fprintf('Longitud del tubo: %.2f metros\n', Long_tubo);

 end
```

11.3 Diseño de la torre de absorción (CA-301)

11.3.1 Objeto del cálculo

El presente apartado tiene como objetivo el dimensionamiento y verificación de un absorbedor gas-líquido destinado a la recuperación del formaldehído presente en la corriente gaseosa procedente del reactor del proceso Formox. El absorbedor permite obtener una disolución acuosa de formaldehído de concentración comercial (formol), minimizando la pérdida de compuesto por la corriente gaseosa de salida.

El diseño se realiza a partir de los datos de balance de materia, aplicando criterios de transferencia de materia (NTU–HTU) y verificaciones hidráulicas habituales en columnas empacadas.

Esta sección del manual se centra en el diseño y cálculo de la unidad crítica de acabado en la producción de formaldehído, la torre de absorción. En este proceso, el gas de reacción (que contiene formaldehído gaseoso proveniente del reactor) debe transferirse de manera eficiente a una fase acuosa para obtener el producto comercial estándar.

11.3.2 Hipótesis y condiciones de operación

Las principales hipótesis adoptadas para el cálculo del absorbedor son:

- Régimen estacionario.
- Absorción en contracorriente gas-líquido.
- Uso de razones molares para describir las composiciones.
- Alta solubilidad del formaldehído en agua.
- Absorción altamente favorable, con reacción física/química en fase líquida.
- Columna empacada con anillos Pall (metálico)
- Operación lejos de condiciones de inundación.

Además, se presentan a continuación diversos parámetros para los que está diseñado el equipo:

Tabla 11.3.1 Condiciones de operación

Parámetro	Valor
Temperatura de operación	47 °C (320 K)
Presión de operación	1,15 atm
Rendimiento de absorción	98 %
Caída de presión total	90 mm H_2O
Producto líquido	Formol 37 % (en peso)
Factor de empaque (F_P)	59 m^{-1}
Diámetro característico del empaque (D_P)	90 mm
Viscosidad de mezcla (μ)	1,5 cP

11.3.3 Balance de materia en el absorbedor

11.3.3.1 Corriente gaseosa de entrada

La corriente gaseosa que entra al absorbedor contiene formaldehído, metanol residual y los gases inertes procedentes del aire de reacción. A partir del balance de materia del proceso, se obtienen los siguientes caudales molares a la entrada del absorbedor:

Tabla 11.3.2 Composición de la corriente gaseosa de entrada

Componente	Caudal másico (kg/día)	Caudal molar (kmol/día)	% molar
Formaldehído	118675,76	3951,91	6,21
Agua	71173,84	3951,91	6,21
Metanol	2584,06	80,65	0,13

Oxígeno	323895,07	10121,72	15,91
Nitrógeno	1274288,39	45510,30	71,54

Los gases inertes considerados para el cálculo son O_2 + N_2.

Por tanto, el caudal molar de gas inerte es:

$$G = n_{O2} + n_{N2} = 74609{,}05 \text{ mol/min}$$

11.3.3.2 Cálculo de la razón molar del soluto en el gas

La razón molar del formaldehído en el gas se define como:

$$Y = \frac{n_{CH_2O}}{n_{inerte}}$$

En la entrada del absorbedor:

$$Y_1 = \frac{2744{,}38}{74609{,}05} = 0{,}0621$$

Al fijar un rendimiento de absorción del 98 %, la razón molar del formaldehído en el gas de salida es:

$$Y_2 = (1 - 0{,}98)\ Y_1 = 1{,}24 \cdot 10^{-3}$$

11.3.3.3 Corriente líquida

El líquido que alimenta al absorbedor es agua. Siendo el producto final es una disolución acuosa de formaldehído (formol).

De acuerdo con el balance de materia y la especificación del producto, se obtiene:

- Formaldehído absorbido: 2543 mol/min
- Agua total en el producto: 10791,15 kmol/d

La razón molar del formaldehído en el líquido de salida es:

$$X_1 = \frac{n_{CH_2O}}{n_{H_2O}} = 0{,}359$$

Mientras que para el líquido de entrada (agua fresca):

$$X_2 = 0$$

El caudal molar del líquido libre de soluto es:

$$L = 11819{,}57 \text{ mol/min}$$

11.3.4 Equilibrio gas-líquido y ley de Henry

En el estudio de la termodinámica y el cálculo aplicado a la ingeniería química, es fundamental comprender cómo se distribuyen los componentes entre una fase líquida y una fase gaseosa. Cuando un sistema alcanza el equilibrio, el flujo neto de moléculas que pasan del líquido al gas y viceversa es cero.

Para soluciones diluidas donde el soluto es un gas que no reacciona químicamente con el solvente, el comportamiento del sistema se describe mediante la Ley de Henry. Esta ley establece que la solubilidad de un gas en un líquido es directamente proporcional a la presión parcial de dicho gas sobre el líquido.

La constante de Henry se calcula a partir de la siguiente fórmula:

$$kh\,(T) = k^{\circ}h \cdot exp\left[\frac{-\Delta H}{R} \cdot \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^{\circ}}\right)\right]$$

$$kh\,(T) = 6{,}94$$

Con el objetivo de obtener la variable “m” para los próximos cálculos para la obtención de la altura de la torre de absorción, el cual da un valor de:

$$m = 0{,}062$$

11.3.5 Cálculo del diámetro del absorbedor

11.3.5.1 Caudal volumétrico del gas

El caudal volumétrico del gas resulta:

$$Q_g = 16{,}81\ m^3/s$$

La densidad del gas es:

$$\rho_g = 1{,}216\ kg/m^3$$

11.3.5.2 Diámetro

Adoptando una velocidad de inundación de:

$$Us = C \cdot \sqrt{\frac{\rho_l - \rho_g}{\rho_g}}$$

$$Us = 4{,}69\ m/s$$

Con una velocidad de diseño de:

$$Us\ diseño = 3{,}29\ m/s$$

Obteniendo un Área superficial de:

$$As = \frac{Qg}{Us}$$

$$As = 5{,}11\ m^2$$

A partir del área se obtiene el diámetro de la comuna dando un valor de:

$$D = 2{,}55\ m$$

Que teniendo en cuenta un margen hidráulico:

$$D_{diseño} = 2{,}8\ m$$

11.3.6 Recta operativa

La recta operativa se define mediante el balance de materia entre fases:

$$Y = Y_2 + \frac{L}{G}(X - X_2)$$

Teniendo el siguiente valor para la pendiente:

$$\frac{L}{G} = 0{,}16$$

La recta operativa queda completamente definida por los puntos:

- $(X_2, Y_2) = (0,\ 1{,}24 \cdot 10^{-3})$
- $(X_1, Y_1) = (0{,}359,\ 0{,}0621)$

11.3.7 Cálculo del número de unidades de transferencia (NTU)

Dado que la absorción es favorable, el número de unidades de transferencia se calcula como:

$$\text{NTU} = \ln\left(\frac{Y_1}{Y_2}\right)$$

$$\text{NTU} = \ln\left(\frac{6{,}21 \cdot 10^{-2}}{1{,}24 \cdot 10^{-3}}\right) = 3{,}37$$

11.3.8 Altura del absorbedor

La altura de una unidad de transferencia (HTU), obtenida de datos típicos para columnas empacadas con anillos Pall, es:

$$\text{HTU} = 1{,}02\ \text{m}$$

La altura efectiva de empaque es entonces:

$$Z = \text{NTU} \cdot \text{HTU} = 3{,}44\ \text{m}$$

Aplicando un margen de diseño, se adopta:

$$Z_{\text{diseño}} = 6{,}0\ \text{m}$$

11.3.9 Verificación hidráulica

Se calcula el factor de carga gas-líquido:

$$F_{LG} = \frac{L}{G} \cdot \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l}} = 5{,}36 \cdot 10^{-3}$$

Este valor indica que la columna opera lejos de condiciones de inundación, confirmando la validez del diámetro calculado.

La caída de presión total estimada es:

$$\Delta P = 90 \text{ mm } H_2O$$

Valor típico y aceptable para una columna empacada de estas características.

11.3.10 Resultado final del diseño

Las dimensiones finales adoptadas para el absorbedor son las siguientes:

Tabla 11.3.3 Resumen del diseño del absorbedor

Parámetro	Valor final
Tipo de columna	Empacada
Empaque	Anillos Pall Fp = 59 m^{-1} Dp = 90 mm
Diámetro	2,8 m
Altura de empaque	6 m
Rendimiento	98 %
ΔP total	90 mm H_2O

El diseño de la torre de absorción se fundamenta en una operación en régimen continuo y en contracorriente, configuración que maximiza el gradiente de concentración y, por ende, la fuerza impulsora de la transferencia de masa. En este sistema, se emplea agua líquida como disolvente para recuperar el formaldehído proveniente de la corriente de salida del reactor, tal y como se ha comentado previamente.

11.4 Diseño del Scrubber (LG-301)

Para el diseño del Scrubber (LG-301) se ha seguido un procedimiento muy similar al de la torre de absorción, es por eso que se van a mostrar los valores obtenidos ya una vez optimizado este mediante la herramienta de simulación HYSYS.

Primeramente se presentan las diversas corrientes que nutren el equipo. Estos se pueden apreciar en la Figura 11.4.1, 11.4.2, 11.4.3 y 11.4.4.

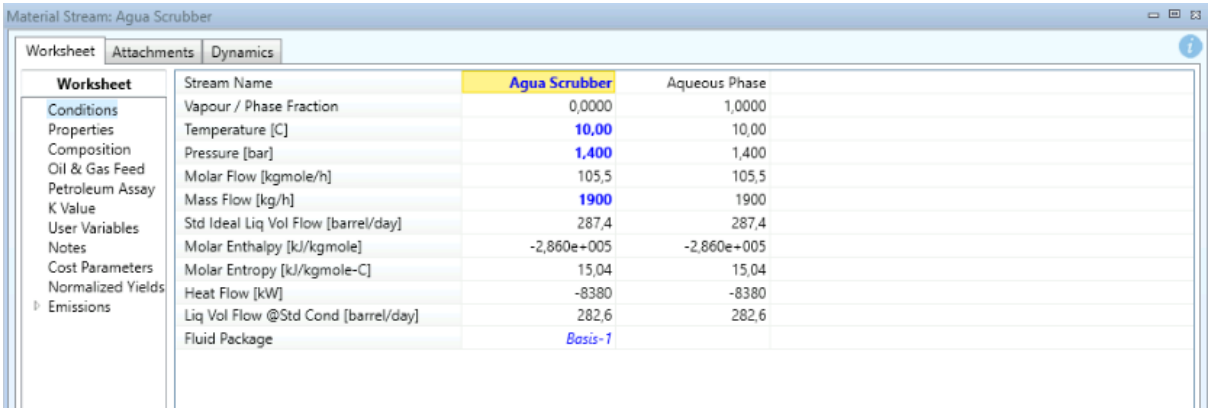


Figura 11.4.1. Condiciones del corriente de entrada de agua al scrubber

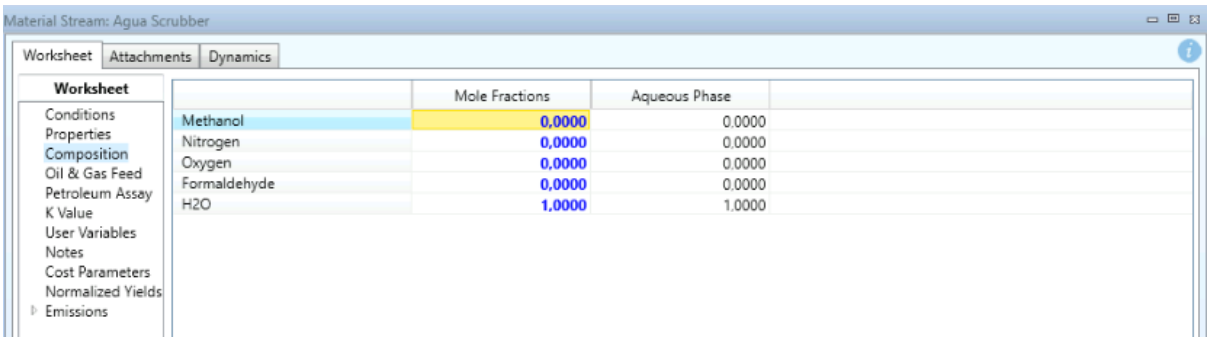


Figura 11.4.2. Composición del corriente de entrada de agua al scrubber

Material Stream: Gasout-

Worksheet | Attachments | Dynamics

Worksheet: Conditions | Properties | Composition | Oil & Gas Feed | Petroleum Assay | K Value | User Variables | Notes | Cost Parameters | Normalized Yields | Emissions

Stream Name	Gasout-	Vapour Phase	Aqueous Phase
Vapour / Phase Fraction	0,9005	0,9005	0,0995
Temperature [C]	9,758	9,758	9,758
Pressure [bar]	1,350	1,350	1,350
Molar Flow [kgmole/h]	2607	2347	259,3
Mass Flow [kg/h]	7,264e+004	6,730e+004	5335
Std Ideal Liq Vol Flow [barrel/day]	1,275e+004	1,186e+004	888,7
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2,797e+004	-2935	-2,546e+005
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	136,3	148,3	27,92
Heat Flow [kW]	-2,025e+004	-1914	-1,834e+004
Liq Vol Flow @Std Cond [barrel/day]	<empty>	<empty>	882,0
Fluid Package	Basis-1		

Figura 11.4.3. Condiciones del corriente de entrada del gas proveniente de la columna de absorción

Material Stream: Gasout-

Worksheet | Attachments | Dynamics

Worksheet: Conditions | Properties | Composition | Oil & Gas Feed | Petroleum Assay | K Value | User Variables | Notes | Cost Parameters | Normalized Yields | Emissions

	Mole Fractions	Vapour Phase	Aqueous Phase
Methanol	0.0013	0.0014	0.0001
Nitrogen	0.7273	0.8076	0.0000
Oxygen	0.1618	0.1797	0.0000
Formaldehyde	0.0249	0.0042	0.2126
H2O	0.0847	0.0071	0.7873

Figura 11.4.4. Composición del corriente de entrada del gas proveniente de la columna de absorción

Una vez definidos estos se presentan los de salida del scrubber, cubriendo así todos corrientes que interaccionan con este equipo de limpieza de gases. Estos corrientes se pueden consultar en la Figura 11.4.5, 11.4.6, 11.4.7 y 11.4.8.

Material Stream: Gas a ambiente

Worksheet | Attachments | Dynamics

Worksheet: Conditions | Properties | Composition | Oil & Gas Feed | Petroleum Assay | K Value | User Variables | Notes | Cost Parameters | Normalized Yields | Emissions

Stream Name	Gas a ambiente	Vapour Phase
Vapour / Phase Fraction	1,0000	1,0000
Temperature [C]	8,544	8,544
Pressure [bar]	1,100	1,100
Molar Flow [kgmole/h]	2344	2344
Mass Flow [kg/h]	6,713e+004	6,713e+004
Std Ideal Liq Vol Flow [barrel/day]	1,182e+004	1,182e+004
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-3190	-3190
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	149,9	149,9
Heat Flow [kW]	-2077	-2077
Liq Vol Flow @Std Cond [barrel/day]	<empty>	<empty>
Fluid Package	Basis-1	

Figura 11.4.5. Condiciones del corriente de salida del gas del scrubber

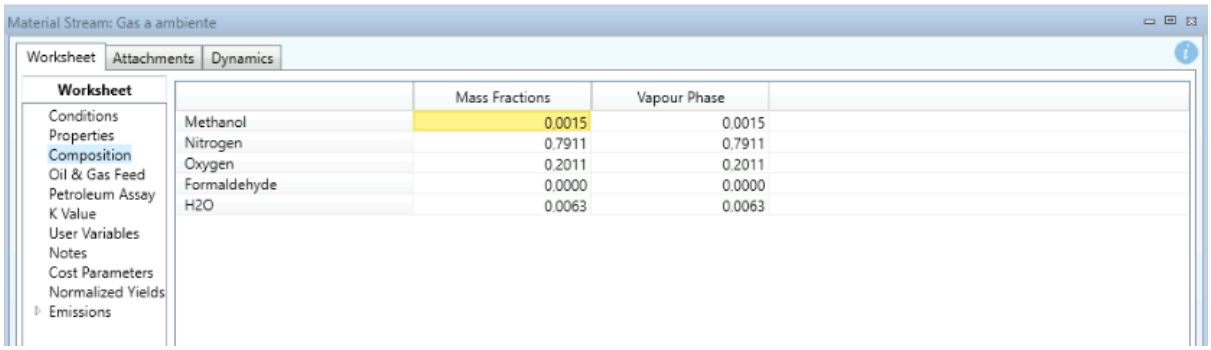


Figura 11.4.6. Composición del corriente de salida del gas del scrubber

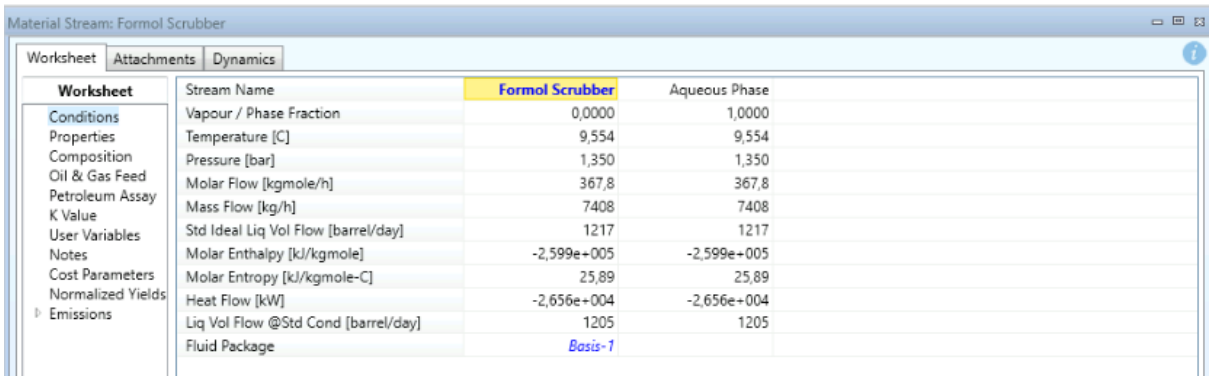


Figura 11.4.7. Condiciones del corriente de salida del líquido del scrubber

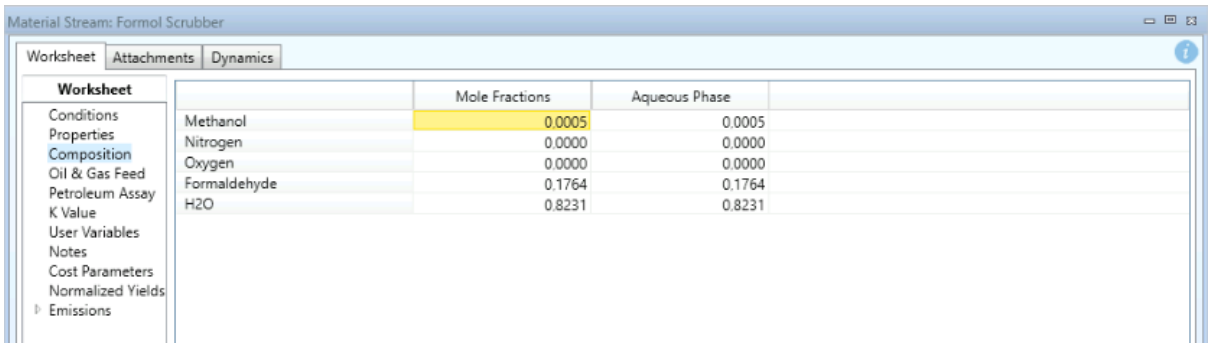


Figura 11.4.8. Composición del corriente de salida del líquido del scrubber

Definidas las corrientes se da a conocer el diseño obtenido mediante el ajuste de parámetros, esto en base a los mensajes recibidos por parte del programa, obteniendo un dimensionamiento capaz de operar de manera óptima en la planta de Formics. Este diseño final se puede consultar en la Figura 11.4.9.

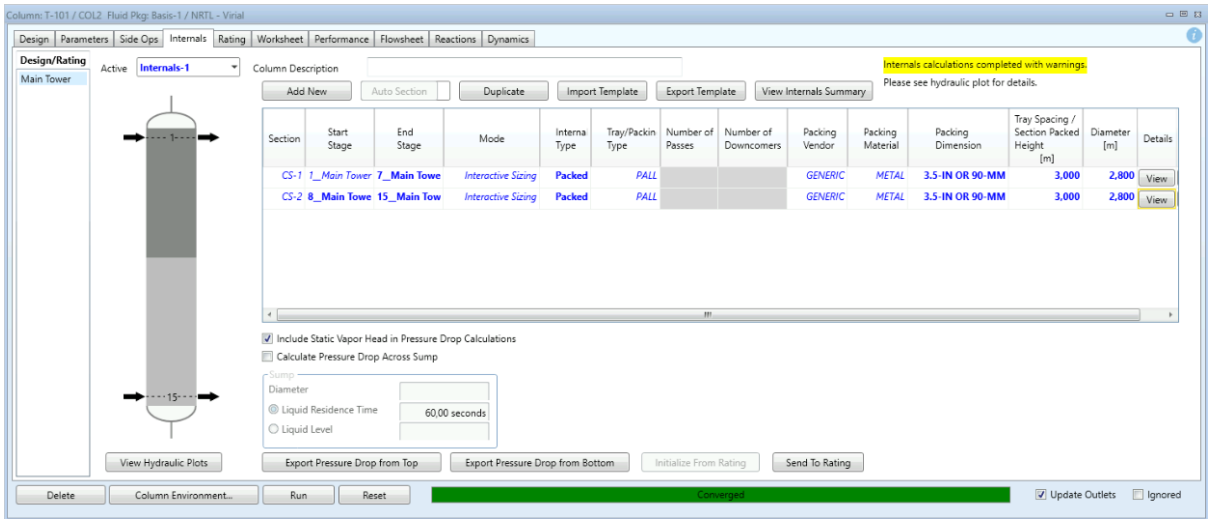


Figura 11.4.9. Internals del scrubber aproximado como una columna de absorción

El dimensionamiento hidráulico del scrubber (aproximado como una columna de absorción secundaria) en HYSYS se ha completado satisfactoriamente, validando un diseño compuesto por dos lechos empaquetados de 3,0 m de altura y un diámetro de 2,8 m.

Debido a la excelente solubilidad del formaldehído en agua, el proceso requiere una relación Líquido / Gas (L/G) baja. Esto desplaza la operación hacia una densidad de riego reducida, y aunque el simulador genera un aviso por trabajar fuera del rango óptimo de las correlaciones empíricas estándar de capacidad, el sobredimensionamiento del diámetro garantiza que la torre operará de forma segura y totalmente alejada de la zona de inundación (flooding).

11.5 Diseño de los intercambiadores de calor

Los intercambiadores de calor se han utilizado a lo largo del proceso de producción de formaldehído con el objetivo de enfriar, calentar, evaporar o condensar los componentes que circulan por el proceso. En la planta de Formics Industrial Chemical son necesarios 5 intercambiadores. En este capítulo, por lo tanto, se muestra una descripción de los tipos que hay:

- Carcasa y tubos: Son los más utilizados en la mayoría de las industrias químicas presentando una gran variedad de configuraciones y permitiendo trabajar en un amplio rango de temperaturas y presiones. El hecho de que presenten elevadas áreas de contacto permite que este tipo de intercambiadores de calor sean ideales para tener un gran intercambio de calor entre el fluido de proceso y el refrigerante, además de su bajo coste y su fácil operación. Tal y como se observa en la Figura 11.5.1, este tipo de intercambiadores constan de una carcasa cilíndrica, que a su vez, presenta en su interior un haz de tubos cilíndricos, con su eje paralelo al eje de la carcasa.

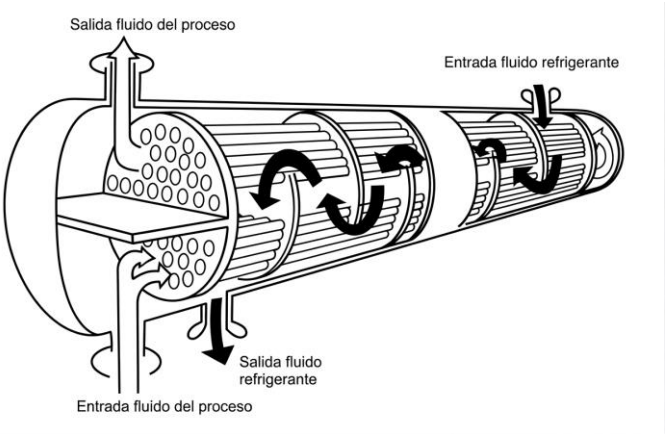


Figura 11.5.1. Intercambiador de calor tipo BEM

- Caldera pirotubular: Las calderas pirotubulares son equipos industriales diseñados para producir vapor mediante la transferencia de calor de los gases de combustión (en este caso gas natural) al agua que los rodea. Su estructura consiste en una carcasa llena de agua que rodea un conjunto de tubos por los cuales circulan los gases calientes generados en la combustión.



Figura 11.5.2. Caldera pirotubular

11.5.1 Diseño de los intercambiadores

Para el diseño térmico, hidráulico y geométrico de los intercambiadores de calor comprendidos en este proyecto, se ha empleado la avanzada herramienta ASPEN Exchanger Design and Rating (EDR), integrada dentro del potente entorno de simulación de Aspen HYSYS.

La elección de este programa es un factor clave, ya que HYSYS está consolidado como el estándar de rigor y excelencia en la industria de la ingeniería de procesos. Utilizar esta herramienta permite llevar a cabo el dimensionamiento y la evaluación de estos equipos de forma extraordinariamente consistente, rápida y eficaz. Al automatizar los complejos cálculos

iterativos de transferencia de calor y pérdida de carga, el software minimiza el margen de error humano y optimiza el tiempo de ingeniería, garantizando diseños altamente eficientes y seguros.

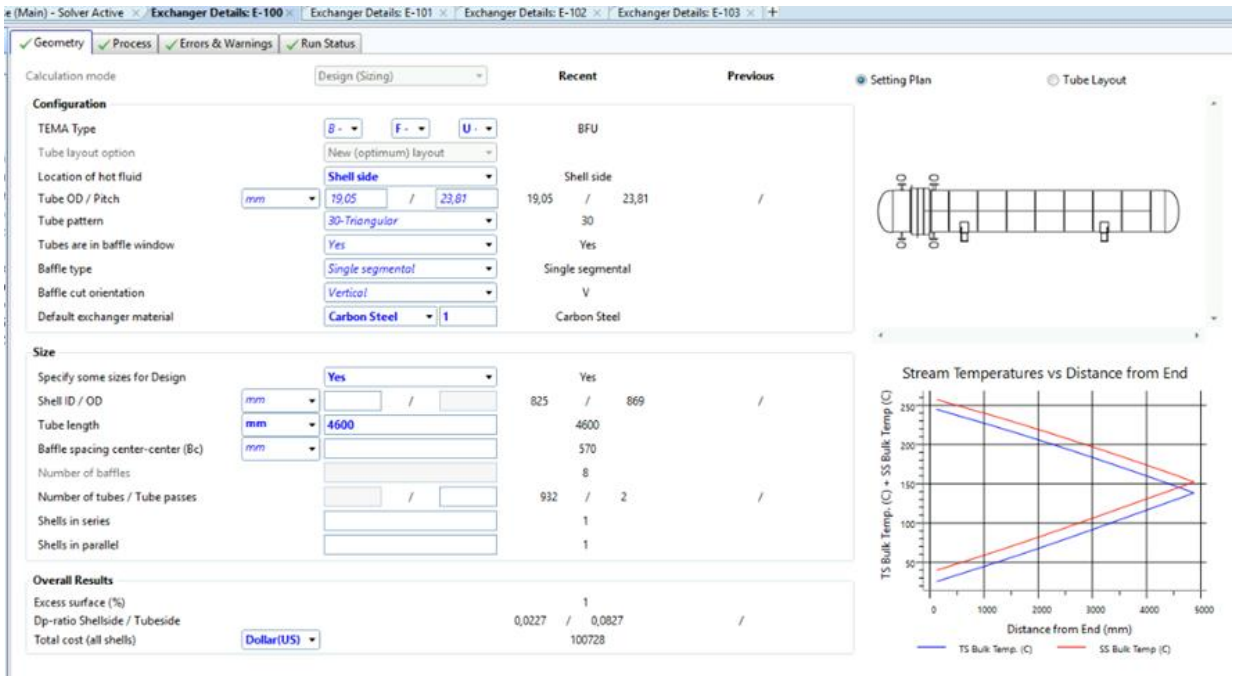
Una de las ventajas más sobresalientes y útiles que ofrece HYSYS frente a otras alternativas es su integración directa con una extensa y rigurosa base de datos de propiedades físicas y modelos termodinámicos. Esto resulta de vital importancia para el diseño de intercambiadores, ya que permite al programa predecir con exactitud el comportamiento de las corrientes, las curvas de liberación de calor, la formación de fases y las propiedades de transporte de los fluidos (como densidad, viscosidad, calor específico y conductividad térmica) bajo cualquier condición de presión y temperatura. Gracias a esta fiabilidad termodinámica, el diseño final del equipo refleja con gran precisión lo que ocurrirá en la planta real.

No obstante, aunque la capacidad computacional y de optimización de HYSYS es muy buena, el planteamiento inicial de los equipos debe fundamentarse en criterios operativos sólidos. Por ello, las decisiones estratégicas y las reglas básicas para la asignación de los fluidos vienen marcadas de manera estricta por las directrices recogidas en la Tabla 11.5.1.

Tabla 11.5.1. Reglas básicas de asignación de fluidos

Carcasa	Tubos
Fluido con menos pérdida de presión	Fluidos a mayor temperatura
Fluido más viscoso	Fluidos a mayor presión
Fluido con menos caudal	Fluido más corrosivo
Fluido a condensar	Fluido más tóxico

A continuación, se muestran algunas imágenes del proceso que se ha seguido para obtener el diseño de cada intercambiador, así como los resultados obtenidos. En este caso todos los intercambiadores que se muestran en las imágenes son del tipo carcasa y tubos.



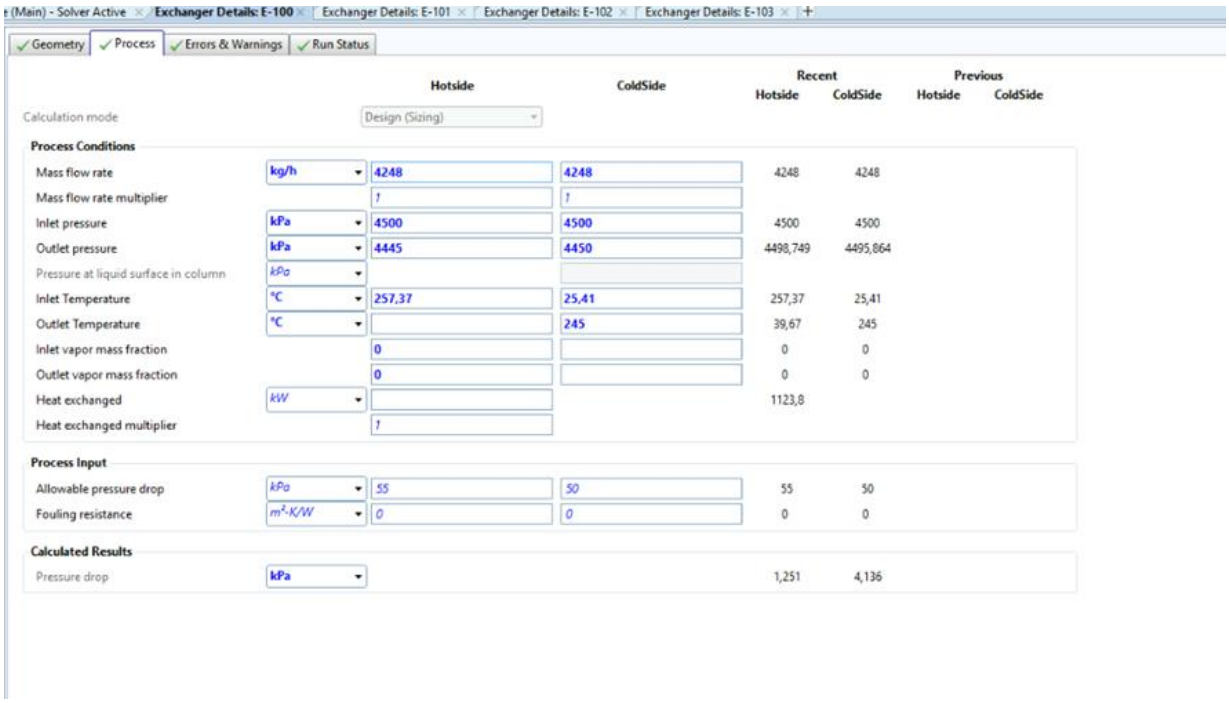
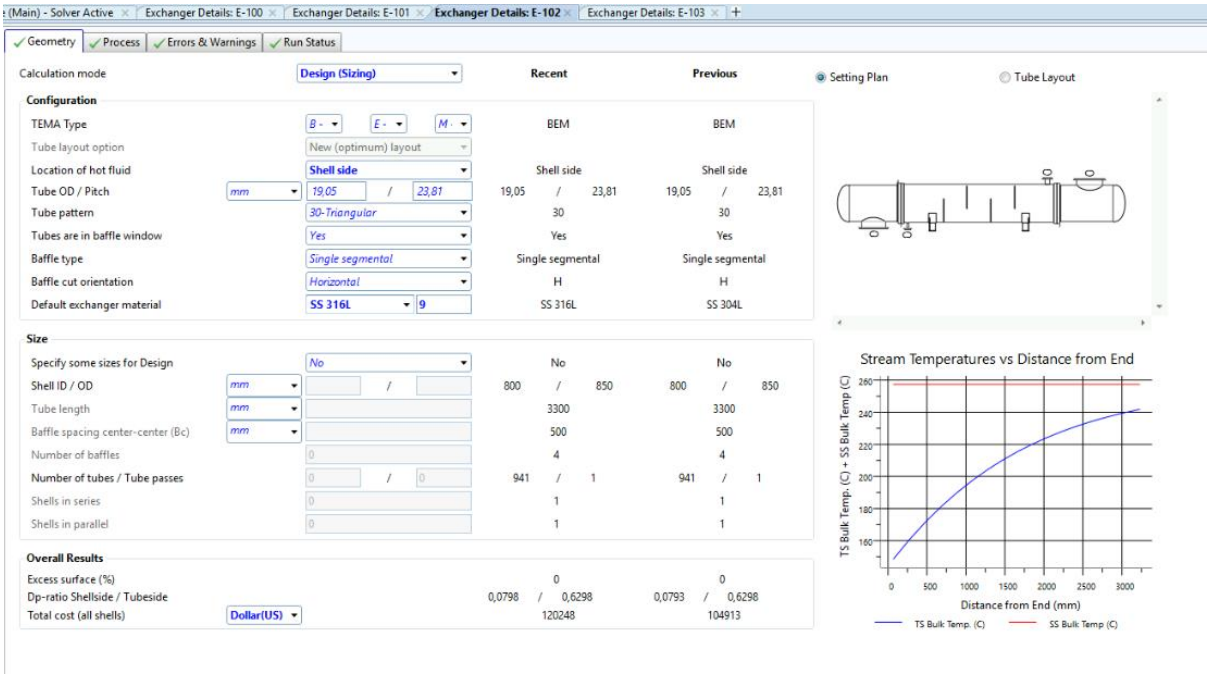


Figura 11.5.3. Diseño Intercambiador E-100



Figura 11.5.4. Diseño Intercambiador E-101



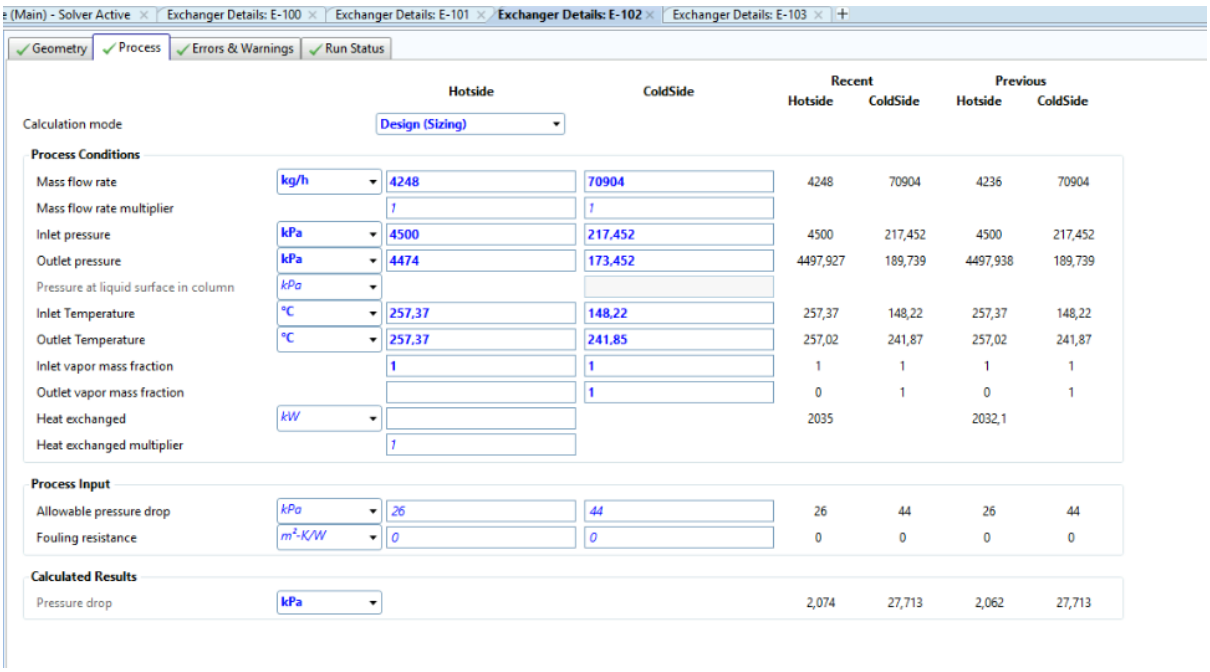
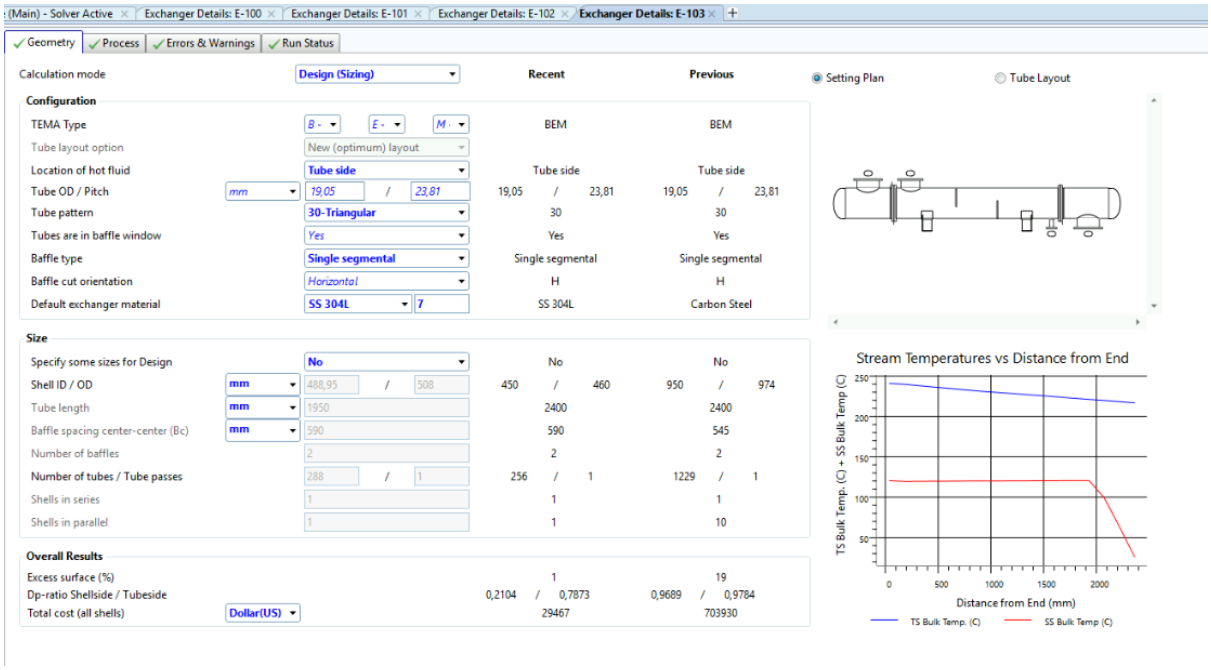


Figura 11.5.5. Diseño Intercambiador E-102



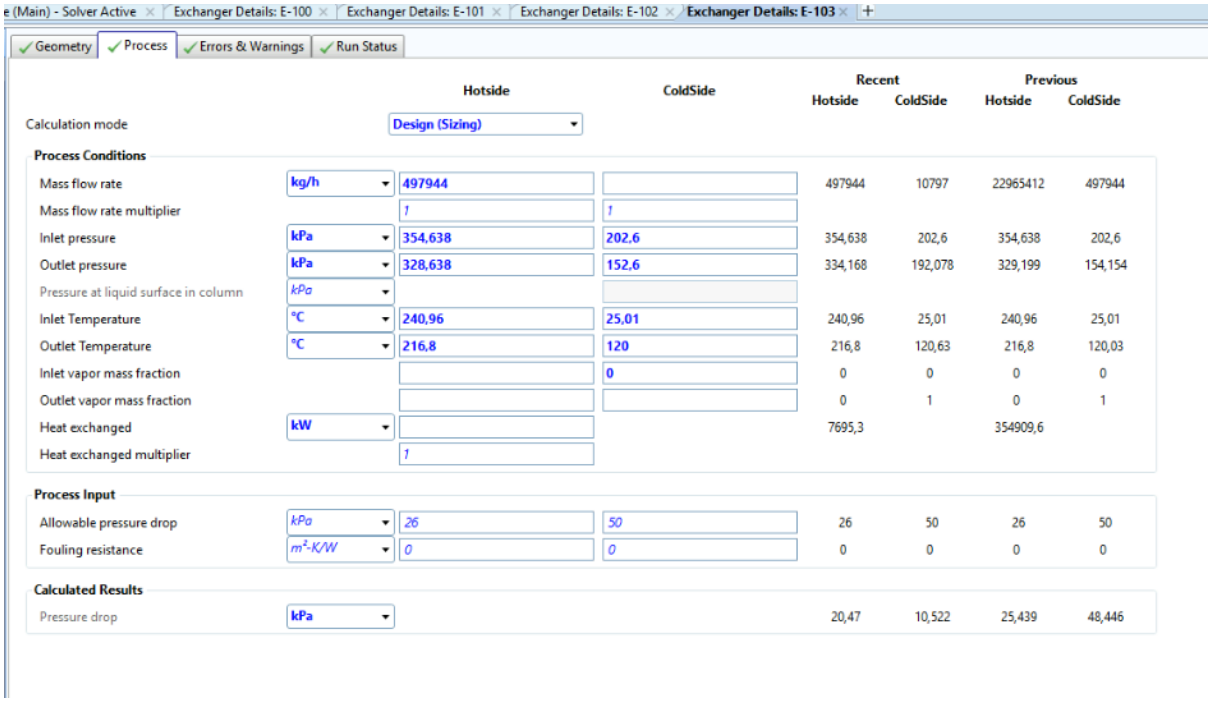


Figura 11.5.6. Diseño Intercambiador E-103

Por otro lado, a pesar de toda la automatización que brinda el programa, se procederá a calcular de forma manual el cociente entre la longitud de los tubos y el diámetro interno de la carcasa (L/Ds). Esta comprobación analítica es imprescindible para verificar que las dimensiones finales generadas por el software se ajustan a las buenas prácticas de diseño mecánico y rentabilidad de construcción, asegurando rigurosamente que dicha relación se encuentre siempre dentro del rango óptimo de $4 < L/Ds < 6$. Los resultados se pueden observar en la Tabla 11.5.2.

Tabla 11.5.2. Cálculo del rango óptimo L/Ds

Intercambiador	Valor de L/Ds
E-100	5,57
E-101	6,93
E-102	4,125
E-103	4

Además, como parte integral del diseño y dimensionamiento térmico e hidráulico de los intercambiadores de calor, y tras evaluar los resultados del modelo de cálculo, se ha verificado que las velocidades operativas de diseño se encuentran estrictamente dentro de los rangos típicos recomendados por la literatura técnica y las buenas prácticas de ingeniería para este tipo de equipos. El cumplimiento de estos parámetros garantiza un funcionamiento coherente, eficiente y seguro, logrando el equilibrio necesario entre los factores críticos operacionales.

11.6 Diseño de las tuberías

El diseño y dimensionamiento de la red de tuberías de la planta se ha llevado a cabo mediante un procedimiento iterativo basado en los caudales de proceso y en procedimientos de diseño estandarizados. El objetivo principal es determinar los diámetros comerciales adecuados para cada conducción, garantizando que las velocidades de los fluidos se mantengan dentro de los rangos óptimos de operación.

A continuación, se detalla la metodología de cálculo secuencial aplicada para la obtención de los parámetros recogidos en la tabla de dimensionamiento.

11.6.1. Caudal volumétrico, velocidad y diámetros

El punto de partida para el cálculo de cada línea es la obtención de las propiedades físicas e hidráulicas de la corriente correspondiente. A partir del simulador de procesos (HYSYS), se extraen dos variables fundamentales para las condiciones de operación (presión y temperatura) de cada tramo; el caudal másico en kg/s y la densidad del fluido en kg/m³.

Como no se conoce inicialmente el diámetro de la tubería, es necesario suponer una velocidad de flujo inicial. Esta velocidad se selecciona utilizando como referencia empírica las tablas de velocidades típicas de proceso (Branan, Carl R., 3ª Edición). Dependiendo del estado de agregación del fluido (líquido, gas, vapor) y de la función de la línea (succión de bombas, líneas

de agua, venteos a la atmósfera, etc.), se adopta un valor de velocidad dentro de los rangos recomendados.

Conociendo el caudal másico, la densidad y la velocidad supuesta, se determina el área de la sección transversal de flujo necesaria mediante la ecuación:

$$A = \frac{m}{\rho \cdot v\ supuesta}$$

Donde A es el área transversal teórica en m².

A partir del área teórica, se despeja el diámetro interno matemáticamente exacto que requeriría la conducción para mantener esa velocidad exacta. Asumiendo una sección circular, la fórmula aplicada es:

$$Dint = \sqrt{\frac{4 \cdot A}{\pi}}$$

11.6.2. Selección del material y del diámetro comercial

Dado que la industria no fabrica tuberías a medida exacta de cada cálculo, se debe estandarizar el diámetro teórico a un diámetro comercial (Nominal Pipe Size, NPS o DN).

1. **Selección del material:** En función de la agresividad química y temperatura del fluido, se asigna el material constructivo (PVC para aguas de servicio, Acero Inoxidable AISI 304L/316L para corrientes con formaldehído/metanol, y Acero al Carbono para gases de chimenea, vapor y aceites térmicos).

2. **Estandarización:** Acudiendo a las tablas normativas correspondientes (ASME B36.10 para acero al carbono y ASME B36.19 para acero inoxidable), se selecciona el Diámetro Nominal cuyo diámetro interior real se aproxime más (por exceso) al diámetro obtenido en el paso previo.

3. **Definición geométrica:** Al elegir el tubo comercial y su cédula (espesor), quedan fijados de forma real el diámetro exterior, el espesor y, por consiguiente, el diámetro interno real.

Al ajustar el diámetro teórico a un diámetro comercial, el área transversal real de la tubería cambia ligeramente respecto a la calculada anteriormente. De esta forma se procede a recalcular la velocidad real utilizando el diámetro interno comercial.

$$v\ recalc = \frac{m}{\rho \cdot \left(\frac{\pi \cdot Dint^2}{4}\right)}$$

Finalmente, se verifica que esta velocidad recalculada siga encontrándose dentro de los márgenes recomendados por las tablas de diseño de *Branan* (tablas 11.6.1, 11.6.2) y la tabla 11.6.3, asegurando así que no habrá problemas de erosión (por velocidades excesivas) ni de deposición/ensuciamiento (por velocidades demasiado bajas), dando por validado el dimensionamiento de la conducción.

Tabla 11.6.2.1 Velocidades típicas de gases (Branan, Carl R., 3ª Edición)

Typical Design Vapor Velocities* (ft./sec.)

Fluid	Line Sizes <6"	8"–12"	≥14"
Saturated Vapor			
0 to 50 psig	30–115	50–125	60–145
Gas or Superheated Vapor			
0 to 10 psig	50–140	90–190	110–250
11 to 100 psig	40–115	75–165	95–225
101 to 900 psig	30–85	60–150	85–165

**Values listed are guides, and final line sizes and flow velocities must be determined by appropriate calculations to suit circumstances. Vacuum lines are not included in the table, but usually tolerate higher velocities. High vacuum conditions require careful pressure drop evaluation.*

Tabla 11.6.2.2 Velocidades típicas de proceso (Branan, Carl R., 3ª Edición)

Servicio	Velocidad (ft/s)
Líquido de proceso	4-6,5
Succión de una bomba (excepto calentamiento)	1-5
Succión de una bomba (calentamiento)	0,5-3
Agua de alimentación a caldera	4-8
Conducciones de purga	1,5-4

Servicio	Velocidad (ft/min)
Chimeneas	2000
Líneas de agua (máx.)	600
Conducciones de vapor a alta presión	10000
Conducciones de vapor a baja presión	12000-15000
Conducciones de vapor a vacío	25000
Conducciones de aire comprimido	2000
Refrigerante líquido	200
Conductos de ventilación	1200-3000

Tabla 11.6.2.3 Velocidades típicas de los diferentes fluidos a través de las tuberías.

TIPUS DE FLUID	TRAM DE CIRCULACIÓ	VELOCITAT (m/s)
LIQUIDS NO VISCOSOS	Canonada d'aspiració (abans de la bomba)	0,6-0,9
	Canonada d'impulsió o línia de procés	1,5-2,5
LIQUIDS 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

11.7 Diseño de las bombas

Una vez que ya tenemos definidos los diámetros y las velocidades del fluido, se procede a presentar el cálculo de los parámetros característicos de las bombas y se presenta un ejemplo para las bombas P-101 y P-102 (duplicadas), que transportan el metanol de los tanques a la unión con el formaldehído (bypass) para estabilizarlo.

11.7.1 Carga total

La carga total de una bomba es la diferencia entre la carga de aspiración y la de impulsión, las cuales se pueden calcular mediante las dos siguientes ecuaciones:

Para aspiración:

$$hasp = \left(\frac{1}{g}\right) \cdot \left(\frac{Pe}{\rho} + \frac{vasp^2}{2}\right)$$

Para impulsión:

$$himp = \left(\frac{1}{g}\right) \cdot \left(\frac{Ps}{\rho} + \frac{vimp^2}{2}\right)$$

Donde:

g: aceleración de la gravedad, con un valor de 9,81 m/s2.
Pe: presión del fluido a la entrada de la bomba (Pa).
Ps: presión del fluido a la salida de la bomba (Pa).
ρ: densidad del fluido a la temperatura de operación de la línea (kg/m3).
vasp: velocidad de paso del fluido por el conducto de aspiración (m/s).
vimp: velocidad de paso del fluido por el conducto de impulsión (m/s).

De esta forma:

$$hasp = \left(\frac{1}{9{,}81}\right) \cdot \left(\frac{141855}{786} + \frac{0{,}32^2}{2}\right) = 18{,}40\ m$$

$$himp = \left(\frac{1}{9{,}81}\right) \cdot \left(\frac{641843{,}21}{786} + \frac{0{,}52^2}{2}\right) = 83{,}25\ m$$

Conociendo estos dos parámetros, podemos obtener la carga total del sistema:

$$h = himp - hasp = 64{,}85\ m$$

11.7.2 NPSH disponible

Con el objetivo de garantizar la viabilidad del sistema, se evalúa el NPSH disponible, un parámetro que cuantifica la carga energética neta real presente en la zona de succión de la bomba. La determinación de este valor es fundamental para verificar que el fluido dispone del margen de presión necesario para evitar la cavitación, un efecto nocivo que puede provocar erosiones mecánicas graves en los componentes internos del equipo y degradar su eficiencia operativa.

A continuación, mediante su ecuación, se muestra un ejemplo de cálculo del NPSH para uno de los tramos anteriores:

$$NPSH\ disponible = h - \frac{Pv}{g \cdot \rho}$$

Donde:

ha: carga de aspiración (m)
Pv: presión de vapor del fluido (Pa)
g: gravedad (m/s2)
ρ: densidad del fluido (kg/m3)

Cabe recalcar que para la obtención de la presión de vapor se utilizará el simulador Aspen Hysys.

$$NPSH\ disponible = 64{,}85 - \frac{16970}{9{,}81 \cdot 786} = \ 16{,}20\ m$$

Una vez se obtiene este parámetro, su valor deberá compararse con el NPSH requerido para la bomba especificada por el proveedor, y se deberá escoger una que tenga un valor inferior al disponible.

11.7.3 Potencia total

Por último, se calcula la potencia total de la bomba. Hay que destacar que este cálculo incluye el rendimiento del equipo, ya que no toda la energía del motor se transmite directamente al fluido, sino que una pequeña parte se pierde por el camino debido a los rozamientos mecánicos. Primero se determina la potencia disponible mediante la siguiente ecuación:

$$Potencia\ disponible = Q \cdot g \cdot \rho \cdot h$$

Donde:

Q: caudal volumétrico (m3/s)
g: gravedad (m/s2)
ρ: densidad del fluido (kg/m3)
h: carga total del sistema (m)

De esta forma:

$$Potencia\ disponible = \left(\frac{0{,}65}{3600}\right) \cdot 9{,}81 \cdot 786 \cdot 64{,}85 = 90{,}28\ W = 0{,}09\ kW$$

Una vez se conoce la potencia disponible, se debe conocer el rendimiento de la bomba. Se debe consultar la Tabla 11.7.3.1, la cual muestra los rendimientos de la bomba establecidos por RITE [15] en función de la potencia disponible.

Tabla 11.7.3.1 Rendimientos en función de las potencias disponibles.

kW	1,1	1,5	2,2	3,0	4,0	5,5	7,5	11	15	18,5	22	30	37	45	55	75	90
%	76,2	78,5	81,0	82,6	84,2	85,7	87,0	88,4	89,4	90,0	90,5	91,4	92,0	92,5	93,0	93,6	93,9

Por lo tanto, el rendimiento de la bomba será del 75%. Con este valor ya se puede calcular la potencia necesaria.

$$Potencia\ total = \frac{Potencia\ disponible}{\%\ rendimiento} = \frac{0{,}09}{0{,}75} = 0{,}12\ kW$$

11.8 Bibliografía

[1] American Petroleum Institute. (2007). *Welded tanks for oil storage* (API Standard 650, 11.ª ed.). Public.Resource.Org. https://law.resource.org/pub/us/cfr/ibr/002/api.650.2007.pdf

[2] Chilexpo. (s.f.). *AISI 316/L, 317*. https://www.chilexpo.com/calidad/316-l-317/

[3] Deshmukh, S. A. R. K., van Sint Annaland, M., & Kuipers, J. A. M. (2005). Kinetics of the partial oxidation of methanol over a Fe-Mo catalyst. *Applied Catalysis A: General*, 289(2), 240–255. https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0926860X05003558

[4] Megyesy, E. F. (1992). *Manual de recipientes a presión: Diseño y cálculo*. Editorial Limusa.

[5] Motahari, S., Moorjani, S. F., & Rahimpour, M. R. (2024). Methanol production: A comprehensive review of processes, catalysts, and reactors. En *Reference Collection in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering*. Elsevier. https://www.researchgate.net/publication/380750776_Methanol_Production_A_Comprehensive_Review_of_Processes_Catalysts_and_Reactors

[6] Organización Internacional del Trabajo. (s.f.). *Ficha Internacional de Seguridad Química (ICSC 0057): Metanol*. https://chemicalsafety.ilo.org/dyn/icsc/showcard.display?p_card_id=57&p_version=2&p_lang=es

[7] Pedernera, M. N., Piña, J., Borio, V., & Borio, D. O. (2003). Modelling of an industrial multitubular reactor for the catalytic oxidation of methanol to formaldehyde. *Chemical Engineering Science*, 58(7), 1359-1370. https://www.google.com/search?q=https://doi.org/10.1016/S0009-2509(02)00611-3

[8] Real Decreto 656/2017, de 23 de junio, por el que se aprueba el Reglamento de Almacenamiento de Productos Químicos y sus Instrucciones Técnicas Complementarias MIE APQ 0 a 10. (2017). *Boletín Oficial del Estado*, (176). https://www.boe.es/eli/es/rd/2017/06/23/656

[9] Thrane, J., Mentzel, U. V., Thorhauge, M., Høj, M., & Jensen, A. D. (2021). A review and experimental revisit of alternative catalysts for selective oxidation of methanol to formaldehyde. *Catalysts*, 11(11), 1329. https://doi.org/10.3390/catal11111329

[10] Ministerio de la Presidencia (España). (2007, 29 de agosto). Real Decreto 1027/2007, de 20 de julio, por el que se aprueba el Reglamento de Instalaciones Térmicas en los Edificios.

Boletín Oficial del Estado, (207), 35931-35984. Recuperado el 11 de junio de 2026, de https://www.boe.es/buscar/doc.php?id=BOE-A-2007-15820

[11] Saint-Gobain Isover Ibérica. (2024). *La Guía Isover: Soluciones de aislamiento*. Recuperado el 11 de junio de 2026, de https://www.isover.es

[12] Asociación de Fabricantes Españoles Lanas Minerales Aislantes [AFELMA] y Asociación Nacional de Instaladores de Sistemas de Aislamiento [ANDIMAI]. (s.f.). *Guía de buenas prácticas: Aislamiento térmico en la industria*. Recuperado el 11 de junio de 2026, de https://www.andimai.es

[13] Green, D. W., & Southard, M. Z. (2019). *Perry's chemical engineers' handbook* (9.ª ed.). McGraw-Hill Education. Capítulo (6, 11 y 23)