



PLANTA PER LA FABRICACIÓ DE FORMALDEHID A PARTIR DE METANOL

TREBALL DE FINAL DE GRAU
ENGINYERIA QUÍMICA

Juny 2026

UAB
Universitat
Autònoma
de Barcelona

Escola
d'Enginyeria

Erik Benito
Alex García
Guillem Iglesias
Adrià Navarro
Mar Pastor
Alejandro Rasero

Tutor: Josep A. Torà





PLANTA PER LA FABRICACIÓ DE FORMALDEHID A PARTIR DE METANOL

TREBALL DE FINAL DE GRAU
ENGINYERIA QUÍMICA

Juny 2026

UAB
Universitat
Autònoma
de Barcelona

Escola
d'Enginyeria

Erik Benito
Alex García
Guillem Iglesias
Adrià Navarro
Mar Pastor
Alejandro Rasero

Tutor: Josep A. Torà



Taula de continguts

11.1 Introducció	3
11.2 Tancs d'emmagatzematge.....	3
11.2.1 Dimensions del tanc.....	3
11.2.2 Cos del tanc.....	4
11.2.2.1 Codi API 650.....	4
11.2.2.2 Codi ASME	5
11.2.3 Cubetes de retenció	6
11.3 Mescladors	7
11.3.1 Exemple de càlcul del mesclador ME-401	7
11.4 Reactor	14
11.4.1 Introducció al disseny del reactor	14
11.4.2 Cinètica de reacció	15
11.4.3 Propietats locals	17
11.4.4 Balanços de matèria amb reacció química.....	19
11.4.5 Balanços d'energia al reactor	21
11.4.6 Pèrdua de pressió al reactor	25
11.4.7 Conversió de reacció.....	27
11.4.8 Dimensionament de l'equip.....	28
11.4.9 Temps de residència	30
11.4.10 Especificacions del reactor.....	31
11.4.11 Cubetes de retenció del reactor.....	38
11.4.12 Codi MATLAB	39
11.5 Columna d'absorció	45
11.5.1 Disseny rigorós de la columna d'absorció	45
11.5.2 Aplicació del codi ASME al disseny de la columna d'absorció	48
11.6. Calderes	57
11.7 Bescanviadors de calor	59
11.7.1. Preparació prèvia	59
11.7.2. Simulació prèvia.....	61
11.7.3. Simulació.....	62

11.8. Evaporadors	67
11.9 Torre de Refrigeració	67
11.10 Canonades, bombes i compressors	67
11.10.1 Dimensionament de canonades	67
11.10.2 Càlcul del gruix dels aïllants de les canonades	69
11.10.3 Dimensionament de bombes	72
11.10.4 Dimensionament de compressors	76
11.11 Serveis	77
11.11.1 Electricitat i transformador elèctric	77
11.12. Cost equips.....	78
11.13 Bibliografia	81

11.1 Introducció

En aquest capítol es recull la metodologia i els càlculs numèrics realitzats per dissenyar els diferents equips de la planta, i s'hi inclouen exemples de càlcul concrets. Així mateix, s'incorporen taules resum al final d'alguns dels equips per tal de facilitar la consulta de les dades de disseny més importants.

Es té en compte que la gran majoria d'equips presents en la planta treballen a pressió, per aquest motiu, resulta necessari aplicar el codi ASME, el qual consisteix en un conjunt de normes utilitzades en enginyeria per assegurar la seguretat, la qualitat i l'eficiència en el disseny, la inspecció i el manteniment dels equips i sistemes.

11.2 Tancs d'emmagatzematge

Els reactius i productes es troben emmagatzemats en tancs, els quals s'han dissenyat segons les característiques del fluid que contenen i la capacitat que han de contenir. Tant els tancs de metanol com els de formaldehid tenen una autonomia de 4 dies.

A continuació es mostra un exemple de dimensionament d'un dels tancs, el de metanol.

11.2.1 Dimensions del tanc

Coneixent el cabal d'entrada del metanol al reactor (5086,13 kg/h), es calcula que per tenir una autonomia de 4 dies de metanol cal emmagatzemar 782,58 m³. En aquest volum està inclòs el sobredimensionament del 10%, per tenir un marge de seguretat en aquests. Com que el volum a guardar és elevat, el que es fa es posar 3 tancs, per tant, el volum de cada tanc és de 260 m³, amb el qual es fa tot el dimensionament.

Per calcular el diàmetre que ha de tenir el tanc, s'escull que la seva alçada serà de 7,5 m. A partir de l'Equació 1, s'aïlla el radi i es calcula:

$$V = \pi \cdot r^2 \cdot h$$

Aïllant el radi:

$$r = \sqrt{\frac{260}{\pi \cdot 7,5}} = 3,32 \text{ m}$$

Una vegada calculat el radi, ja es pot saber el diàmetre:

$$D = 2 \cdot r = 2 \cdot 3,32 = 6,64 \text{ m}$$

Les dimensions de la resta de tancs de metanol i dels altres components a emmagatzemar es troben a continuació a la *Taula 11.2.1*. El càlcul de totes les dimensions s'ha fet amb el mateix procediment que s'ha explicat.

Taula 11.2.1. Dimensions dels tancs

Nom equip	Substància	Volum (m³)	Diàmetre (m)	Alçada (m)
TE-101, 102 i 103	Metanol	260	6,64	7,5
TE-501, 502, 503 i 504	Formaldehid	230	6,47	7
TE-601	Nitrogen	10	2	3,2
TE-602	Nitrogen	3	1,25	2,76
TE-603	Therminol 66	35	3	4,9
TE-604	Therminol 66	10	2,4	2,2

11.2.2 Cos del tanc

Per calcular el cos dels tancs s'ha seguit dues metodologies diferents, depenent del tipus de tanc. Els codis a seguir són l'API 650 i l'ASME.

11.2.2.1 Codi API 650

La part del disseny del cos dels tancs d'emmagatzematge del metanol, el formaldehid i el therminol es fa seguint la norma API 650, la qual estableix els criteris pel càlcul i dimensionament de tancs amb soldadura que operen a pressió atmosfèrica o a baixa pressió. En el cas d'aquests dos tipus de tancs, la pressió és atmosfèrica. Aquesta normativa és àmpliament utilitzada en la indústria química per l'emmagatzematge de substàncies inflamables com el metanol.

A diferència de codis com el ASME, els quals estan orientats al disseny de recipients sotmesos a pressions internes elevades, el codi API 650 considera els efectes de la pressió hidroestàtica i les condicions reals d'operació de tancs de gran volum.

El material seleccionat, com ja s'ha exposat al capítol d'**Equips** és l'acer inoxidable AISI 316L, degut a la seva elevada resistència a la corrosió i la presència d'atmosferes explosives per la inflamabilitat del metanol.

El mètode que es fa servir, establert en API 650, s'anomena "*One-foot method*". Aquest consisteix en determinar el gruix en funció de l'alçada del líquid sobre cada punt del tanc, considerant que la pressió hidroestàtica va augmentant a mesura que també ho fa la profunditat. Independentment del càlcul matemàtic, la norma exigeix que pels tancs amb un diàmetre inferior a 15 m el gruix mínim sigui de 5 mm.

L'equació que es fa servir per saber el gruix és la següent (*Equació 2*):

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

On:

td = gruix requerit (mm)

D = diàmetre del tanc (m)

H = alçada nivell líquid (m)

G = gravetat específica del fluid

E = eficiència de la juntura

S_d = esforç admissible del material (MPa)

CA = sobre gruix per corrosió (mm)

Amb les dades del metanol per a aquest càlcul, l'equació queda de la següent forma:

$$td = \frac{4,9 \cdot 6,64 \cdot (7,5 - 0,3) \cdot 0,79}{1 \cdot 117} + 1 = 2,58 \text{ mm}$$

Com que el gruix obtingut és menor al mínim dictat per la norma, es decideix que el gruix del cos del tanc sigui de 6 mm, afegint el sobre gruix per corrosió.

La resta de tanc a pressió atmosfèrica segueixen el mateix procediment de càlcul.

11.2.2.2 Codi ASME

Pel que fa els tancs que emmagatzemen a altes pressions, aquests segueixen la normativa i metodologia del codi ASME secció VIII. El càlcul del gruix del tanc es fa segons l'Equació 3:

$$t = \frac{P \cdot R}{S \cdot E - 0,6 \cdot P}$$

On:

P = pressió interna (MPa)

R = radi tanc (mm)

S = esforç de l'acer (MPa)

E = eficiència de la junta

Per l'exemple de càlcul amb el tanc pulmó de nitrogen, els valor estimats de P , S i E són 0,8 MPa, 115 MPa i 0,85 respectivament. Per tant, el càlcul queda de la següent manera, tenint en compte que el radi són 625 mm i opera a 8 bar (0,8 MPa):

$$t = \frac{0,8 \cdot 625}{115 \cdot 0,85 - 0,6 \cdot 0,8} = 5,14 \text{ mm}$$

Aplicant un marge de seguretat per corrosió, el gruix de la paret del tanc és de 8 mm.

A continuació, en la *Taula 11.2.2* hi ha el recull de valors de gruix de les parets de tots els tancs presents a la planta:

Taula 11.2.2. Gruix de les parets dels tancs

Nom equip	Substància	Codi disseny	Gruix calculat (mm)	Gruix sobreestimat (mm)
TE-101, 102 i 103	Metanol	API 650	2,58	6
TE-501, 502, 503 i 504	Formaldehid	API 650	3,91	6
TE-601	Nitrogen	ASME	4,30	7
TE-602	Nitrogen	ASME	5,14	8
TE-603	Therminol 66	API 650	3,42	6
TE-604	Therminol 66	ASME	12,35	14

11.2.3 Cubetes de retenció

El volum útil de la cubeta ha de ser com a mínim del 100% del volum del tanc més gran, però per tal de tenir un marge de seguretat, es calcula tenint en compte que ha de ser un 110% del volum total. Per tant, el que es fa és multiplicar el volum del tanc que es vol tenir en la cubeta per 1,1. Un exemple d'aquest càlcul és el següent:

$$V_{\text{cubeta}} = 1,1 \cdot 260 = 286 \text{ m}^3$$

A l'hora de fer el dimensionament d'aquesta, s'ha de tenir en compte aspectes importants com l'alçada i a la distància de seguretat entre el tanc i el mur de la cubeta. E primer lloc, el mur no pot ser molt alt perquè s'ha de facilitar la ventilació i l'accés fàcil a aquesta. Els valors màxims estan entre 1 i 1,5, és per això que s'ha escollit una alçada d'1,2 m.

Tot i que els tancs que contenen la mateixa substància poden estar dins de la mateixa cubeta, s'ha decidit posar una cubeta per a cada tanc, ja que en cas d'alguna fuga en un dels tancs, la resta no es veurien afectats. Tot i això, en la taula que recull les dades de les dimensions de totes les cubetes, s'agrupen els tancs que emmagatzemen el mateix producte perquè tots tenen les mateixes dimensions i, per tant, les seves cubetes de retenció també són idèntiques entre elles.

A continuació, en la *Taula 11.2.3*, es troben les dimensions de les cubetes de retenció de tots els tancs presents a la planta:

Taula 11.2.3. dimensions de les cubetes de retenció

Equip	Substància	Capacitat (m³)	Dimensions (m)	Alçada (m)
TE-101, 102 i 103	Metanol	286	13,8 x 13,8	1,5
TE-501, 502, 503 i 504	Formaldehid	253	13 x 13	1,5
TE-603	Therminol 66	38,5	5,7 x 5,7	1,2

11.3 Mescladors

Com s'ha esmentat en diferents capítols, la planta disposa de diverses opcions de barreja de corrents en funció de l'estat de les mescles i de la composició dels corrents. Encara que els mescladors de gasos i de líquids s'adquireixen per catàleg, és necessari dimensionar-ne les característiques de disseny, tal com es mostra a continuació.

11.3.1 Exemple de càlcul del mesclador ME-401

A partir del balanç de matèria, es determina que el cabal volumètric de sortida d'aquest mesclador és de 15,22 m³/h, a una temperatura de 53,67 °C i una pressió de 1,013 bar. La composició en formaldehid de la mescla és del 37 % en pes, de manera que es compleixen les especificacions del procés.

Per al disseny del tanc mesclador, s'estableix un temps de residència de 5 minuts. Aquest valor es considera un estàndard de disseny industrial adequat per a operacions contínues d'homogeneïtzació de mescles líquides miscibles. Aquest temps de residència garanteix una homogeneïtzació completa i uniforme dels components mitjançant l'agitació, alhora que permet optimitzar el volum geomètric de l'equip.

Per calcular el volum del tanc, s'utilitza l'Equació 4.

$$V = Q * \tau$$

On:

$$Q = \text{cabal volumètric} \left(\frac{\text{m}^3}{\text{h}} \right)$$

$$\tau = \text{temps de residència (min)}$$

A partir de les dades de disseny, es pot portar a terme aquesta equació:

$$V = 15,22 * 5 * \frac{1}{60} = 1,27 \text{ m}^3$$

Aquest volum correspon al volum ocupat per la mescla a l'interior del tanc. Es considera que la mescla ha d'ocupar el 80 % del volum total del tanc, amb l'objectiu de disposar d'un marge de seguretat operativa. En conseqüència, el volum total del tanc és de 1,58 m³.

A partir d'aquest volum, es calculen el diàmetre i l'altura del tanc cilíndric de procés, assumint una relació altura-diàmetre (H/D) d'1,5 i utilitzant l'Equació 5.

$$V = \frac{\pi}{4} * D^3 * H$$

On:

$$D = \text{Diàmetre del tanc (m)}$$

$$H = \text{Alçada del tanc (m)}$$

A partir del volum calculat i de la relació alçada-diàmetre determinada, es pot prosseguir amb aquesta equació:

$$V = \frac{\pi}{4} * 1,5 * D^3 \rightarrow 1,58 = \frac{\pi}{4} * 1,5 * D^3 \rightarrow D = \sqrt[3]{\frac{4 * 1,58}{1,5 * \pi}} = 1,10 \text{ m}$$

$$H = 1,5 * D = 1,5 * 1,10 = 1,65 \text{ m}$$

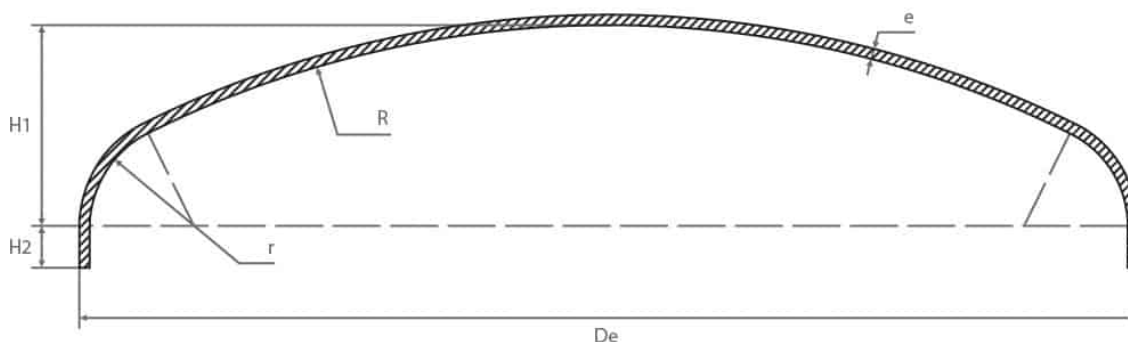


Figura 11.3.1. Representació d'un capçal de tipus torisfèric

Aquests valors s'obtenen assumint un tanc mesclador cilíndric. Tanmateix, el disseny final incorpora un capçal superior i un fons inferior de tipus torisfèric, atès que l'equip opera a pressió atmosfèrica, tal com es mostra a la Figura 11.3.1.

Mitjançant l'Equació 6, basada en la geometria definida per la norma DIN 28011, es determina el volum intern dels capçals i, posteriorment, el volum corresponent al cos cilíndric del tanc mesclador. Aquesta equació té en compte la pestanya recta (*Straight Flange*, SF), ja que aquest element permet allunyar la línia de soldadura de la zona de curvatura. Per a aquest disseny, se selecciona una SF de 50 mm, d'acord amb els estàndards habituals de fabricació.

$$V \text{ intern capçals} = 0,08467 * Di^3 + \frac{\pi * Di^2}{4} * SF$$

On:

Di = Diàmetre intern del mesclador (m)

SF = Straight Flange (m)

A partir de les dades de disseny, es pot portar a terme aquesta equació:

$$V \text{ intern capçals} = 0,08467 * 1,10^3 + \frac{\pi * 1,10^2}{4} * 0,05 = 0,16 \text{ m}^3$$

$$V \text{ intern virola} = 1,58 - 2 * 0,16 = 1,26 \text{ m}^3$$

Per continuar amb el disseny del tanc de mescla, és necessari determinar el gruix del material de construcció. En aquest cas, se selecciona acer inoxidable AISI 316L, ja que presenta una elevada resistència a la corrosió en presència de formaldehid en medi aquós. Aquest compost tendeix a oxidar-se i a formar àcid fòrmic, una substància amb un elevat potencial corrosiu per als acers inoxidables convencionals.

Tot i que el tanc opera a una pressió de 1,013 bar, el seu disseny es realitza d'acord amb el codi ASME, concretament la Secció VIII, Divisió 1 [16], atès que es tracta d'un recipient a pressió de petites dimensions (1,58 m³). Per tant, els càlculs que es presenten a continuació es determinen seguint els criteris establerts en aquest codi de disseny.

Per calcular el gruix de la virola del tanc, s'utilitza l'Equació 3, aplicable al dimensionament de carcasses cilíndriques sotmeses a pressió interna.

Per aplicar aquesta equació, la pressió de disseny (P) es determina a partir de la Taula 11.5.2. de l'Equació 51. Considerant una pressió màxima d'operació d'1,013 bar, s'adopta una pressió de disseny de 3,5 bar.

D'altra banda, la tensió màxima admissible del material (S) es determina a partir de la temperatura de disseny, calculada mitjançant l'Equació 52 i de les dades recollides al codi ASME, concretament a la Secció II, Part D [17]. D'aquesta manera, s'obté un valor de 115 MPa, equivalent a 1.150 bar.

Finalment, d'acord amb les directrius de la Taula UW-12 del codi ASME Secció VIII, Divisió 1 [16], se selecciona una unió a topall amb soldadura doble (junta de tipus 1). Així mateix, considerant les condicions d'operació i amb l'objectiu d'optimitzar els costos d'inspecció mantenint la seguretat estructural requerida, s'adopta un grau de radiografiat parcial. En conseqüència, el factor d'eficiència de soldadura emprat en el càlcul dels gruixos és E = 0,85.

A partir d'això, es pot determinar el gruix del mesclador:

$$t = \frac{3,5 \cdot 0,55}{1150 \cdot 0,85 - 0,6 \cdot 3,5} = 0,00197 \text{ m} = 1,97 \text{ mm}$$

Tot i que el gruix mínim requerit per pressió, calculat d'acord amb el codi ASME, és de 1,97 mm, a aquest valor s'hi afegeix un sobregruix de corrosió d'1 mm. En conseqüència, s'obté un gruix requerit de 2,97 mm.

Malgrat que el gruix comercial immediatament superior correspon a 3 mm, s'adopta finalment un gruix nominal de 5,0 mm tant per a la virola com per als fons torisfèrics. Aquesta decisió es basa en un criteri de gruix mínim constructiu, amb l'objectiu de garantir una rigidesa mecànica adequada de l'equip durant les operacions de transport, muntatge i funcionament, així com davant les vibracions generades pel sistema d'agitació.

Un cop definit el gruix del material, es determina el volum exterior del tanc, paràmetre necessari per al càlcul del pes de l'equip.

Pel que fa als capçals, el volum exterior es calcula de manera anàloga al volum intern, incorporant el gruix del material al diàmetre de càlcul, tal com es mostra a l'Equació 7.

$$V_{\text{extern capçals}} = 0,08467 * (Di + 2 * t)^3 + \frac{\pi * (Di + 2 * t)^2}{4} * SF$$

On:

Di = Diàmetre intern del mesclador (m)

SF = Staright Flange (m)

t = gruix del mesclador (m)

A partir de les dades de disseny, l'equació queda de la següent manera:

$$V_{\text{extern capçals}} = 0,08467 * (1,10 + 2 * 0,005)^3 + \frac{\pi * (1,10 + 2 * 0,005)^2}{4} * 0,05 = 0,17 \text{ m}^3$$

Per determinar el volum extern de la virola, cal conèixer l'altura real d'aquest cilindre, que es pot obtenir mitjançant el valor del volum intern d'aquesta part i l'Equació 5.

$$V = \frac{\pi}{4} * D^2 * H \rightarrow H = \frac{4 * V}{\pi * D^2} = \frac{4 * 1,58}{\pi * 1,10^2} = 1,66 \text{ m}$$

$$V_{\text{extern virola}} = \frac{\pi}{4} * (D + 2 * t)^2 * H = \frac{\pi}{4} * (1,10 + 2 * 0,005)^2 * 1,66 = 1,61 \text{ m}^3$$

Per tal de trobar el pes del tanc buit, es determina el volum que ocupa l'acer inoxidable 316L mitjançant l'Equació 8.

$$V_{316L} = A_{\text{total}} * t$$

On:

A_{total} = Superfície total del 316 L (m²)

t = gruix del mesclador (m)

Primer s'ha de calcular la superfície total de l'acer inoxidable 316 L mitjançant l'Equació 9.

$$A_{\text{total}} = A_{\text{virola}} + A_{\text{capçals}}$$

On:

A_{virola} = Superfície de la virola (m²)

$A_{\text{capçals}}$ = Superfície capçals (m²)

A partir de les dades calculades anteriorment, es poden solucionar aquestes equacions:

$$A_{total} = \pi * 1,10 * 1,65 + 2 * (1,2 * \pi * 0,55^2) = 7,98 \text{ m}^2$$

$$V_{316L} = 7,98 * 0,005 = 0,04 \text{ m}^3$$

Un cop determinat el volum ocupat per l'acer inoxidable AISI 316L, i a partir de la seva densitat, igual a 8.000 kg/m³, es determina que el pes del tanc buit és de 320 kg. Si a aquest valor s'hi afegeix el pes de la mescla continguda al seu interior, considerant que aquesta ocupa el 80 % del volum total disponible i presenta una densitat de 1.090 kg/m³, s'obté un pes total en operació de 1.704,3 kg.

D'altra banda, també és necessari definir el sistema d'agitació del tanc mesclador. Per a aquesta aplicació, se selecciona un agitador de tipus hèlix marina (*Marine Propeller*), ja que la mescla està formada per dos líquids miscibles de baixa viscositat, formalina i metanol. L'objectiu principal consisteix a maximitzar la circulació axial del fluid per tal d'aconseguir una homogeneïtzació ràpida amb un consum energètic reduït.

L'agitador seleccionat disposa de tres pales de tipus *Marine Propeller* i s'instal·la de forma lateral descentrada o bé amb l'eix vertical inclinat entre 10° i 15°. Aquesta configuració evita la formació d'un vòrtex central i afavoreix una mescla més eficient. El diàmetre de l'hèlix es fixa en el 50 % del diàmetre intern del tanc, corresponent a un valor de 0,55 m.

Per garantir una circulació adequada del fluid i minimitzar la presència de zones amb baixa renovació, l'agitador es col·loca a una distància del fons equivalent a un terç del diàmetre del tanc, és a dir, 0,37 m. D'altra banda, la longitud de l'eix de l'agitador es determina considerant l'altura útil del tanc i un marge addicional de 0,25 m associat al gruix de la tapa, al sistema de segellat mecànic i a l'acoblament amb el motor. D'aquesta manera, s'obté una longitud total de 1,54 m.

A continuació, es calcula la potència requerida per al sistema d'agitació. Per fer-ho, es determina en primer lloc el nombre de Reynolds mitjançant l'Equació 10.

$$Reynolds = \frac{\rho * N * Da^2}{\mu}$$

On:

$$\rho = \text{Densitat de la mescla} \left(\frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} \right)$$

$$N = \text{Velocitat de rotació (rps)}$$

$$Da = \text{Diàmetre de l'agitador (m)}$$

$$\mu = \text{Viscositat de la mescla (Pa * s)}$$

Per aplicar aquesta equació, és necessari determinar la viscositat de la mescla. Per a això, s'utilitza l'Equació 11, corresponent al model exponencial d'Arrhenius, ja que es considera el mètode més adequat per estimar la viscositat de mescles de líquids miscibles de baixa viscositat.

$$\mu_{mix} = \mu_1^{x_1} * \mu_2^{x_2}$$

On:

μ = Viscositat de cada compostos (cP)

x = Fracció molar de cada compost

A partir de les dades d'Aspen HYSYS sobre els diferents compostos de la mescla, es pot realitzar aquest càlcul:

$$\mu_{mix} = 0,2874^{0,9522} * 0,5447^{0,0478} = 0,2963 \text{ cP} = 2,963 * 10^{-4} \text{ Pa} * \text{s}$$

Un cop es coneix el valor de la viscositat de la mescla i s'estableix una velocitat d'agitació de 150 rpm (2,5 rps), es resol l'Equació 10. Aquesta velocitat es considera adequada, ja que garanteix un règim plenament turbulent i una homogeneïtzació ràpida de la mescla, alhora que evita un consum energètic excessiu i la formació de vòrtexs o vibracions mecàniques associades a velocitats superiors.

$$Reynolds = \frac{1090 * 2,5 * 0,55^2}{2,963 * 10^{-4}} = 2782019,91$$

A partir d'aquest nombre de Reynolds, es determina el nombre de potència (N_p) necessari per al càlcul de la potència de l'agitador. Aquest paràmetre depèn exclusivament del nombre de Reynolds i es pot obtenir gràficament a partir de la corba representada a la Figura 11.3.2.

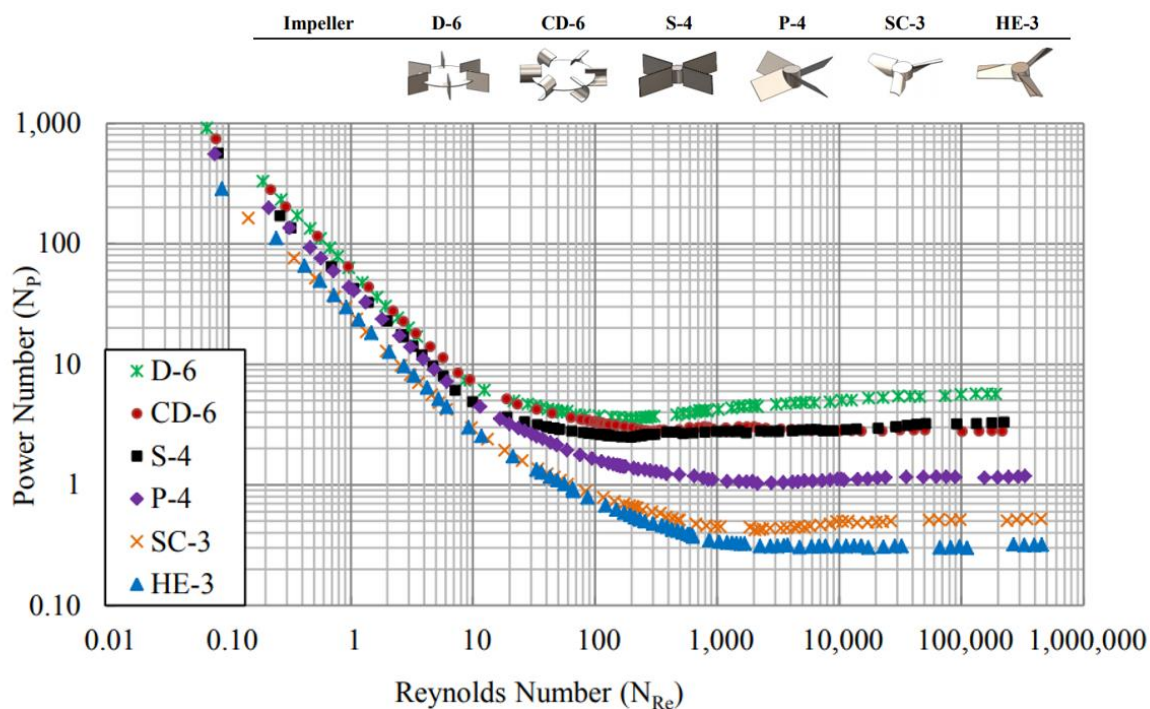


Figura 11.3.2. Representació gràfica de la relació entre el nombre de Reynolds i el nombre de potència

La corba HE-3 de la Figura 11.3.2 representa la relació característica per a aquest disseny, atès que correspon a un agitador de tipus hèlix marina. Tot i que el rang de la gràfica no abasta explícitament el nombre de Reynolds calculat, s'observa com el coeficient de potència (N_p) esdevé constant a partir d'un nombre de Reynolds de 10^5 . Per tant, es determina un valor de N_p igual a 0,3 per a les condicions de règim turbulent desenvolupat. Aquest valor permet calcular la potència requerida per l'agitador mitjançant l'Equació 12.

$$P = N_p * \rho * N^3 * D^5$$

On:

N_p = Número de potència

ρ = Densitat del fluid $\left(\frac{Kg}{m^3}\right)$

N = Velocitat de rotació (rps)

D = Diàmetre del agitador (m)

A partir de les dades de disseny de l'agitador, es pot realitzar el càlcul de la potència:

$$P = 0,3 * 1090 * 2,5^3 * 0,55^5 = 257,15 \text{ W}$$

11.4 Reactor

11.4.1 Introducció al disseny del reactor

Pel disseny del reactor s'ha escollit un reactor multi tubular de llit fix. Aquesta configuració és molt utilitzada en el procés FORMOX.

L'oxidació parcial del metanol és una reacció altament exotèrmica, per això, controlar adequadament la temperatura és fonamental per evitar la formació de punts calents (*Hotspots*) al llit catalític i conservar una alta selectivitat cap al formaldehid. D'acord amb la bibliografia, els reactors emprats en el procés FORMOX solen ser equips de carcassa i tubs, amb llits fixos de catalitzador dins dels tubs i un fluid refrigerant circulant per l'exterior per eliminar la calor de reacció.

La simulació del reactor s'ha realitzat amb MATLAB. En aquest model s'han resolt els balanços diferencials de matèria, energia i pressió al llarg de la massa de catalitzador. Aquesta elecció s'ha realitzat amb l'objectiu d'obtenir els perfils interns del reactor, en particular la conversió de metanol, la temperatura del gas, la temperatura del fluid refrigerant i la pressió. Tot i que el model no inclou tots els fenòmens tridimensionals que tenen lloc en un equip real, sí que permet descriure de manera raonable el comportament axial del reactor i analitzar com influeixen les principals variables de disseny en la seva operació.

Com a fase catalítica s'ha considerat una mescla de catalitzador de ferro-molibdè (Fe-Mo) amb un material inert. El catalitzador Fe-Mo és el més característic del procés FORMOX per a l'oxidació de metanol a formaldehid. Tenint en compte el fort caràcter exotèrmic de la reacció, s'ha plantejat la dilució del llit amb un sòlid inert, amb la finalitat de disminuir la generació de calor per unitat de volum de llit i obtenir un perfil de temperatura menys agressiu dins dels tubs. Aquesta mesura ajuda a reduir la intensitat dels punts calents (*Hotspots*) i facilita el control tèrmic del reactor, sobretot a la zona inicial del llit, on les concentracions de metanol i oxigen són més elevades i, per tant, la velocitat de reacció també és més alta. Aquesta elecció de dilució del llit s'ha pres fent referència l'article científic [1] on es comenta el disseny d'un reactor multi tubular en el procés de producció de metanol.

La densitat aparent del llit catalític s'ha pres igual a $1000 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, valor equivalent a $1 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$. Aquesta elecció es basa en la informació recollida a la patent [2], on s'utilitza una densitat aparent de $1 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ per a un catalitzador convencional de formaldehid basat en molibdat de ferro. Per aquest motiu, el valor adoptat es considera representatiu per a una primera aproximació del disseny del reactor multi tubular.

Com a material inert s'ha considerat un carrier esfèric basat en alumina i òxid de magnesi. Aquests materials són habituals com a suports o diluents en llits catalítics per la seva estabilitat tèrmica, resistència mecànica i baixa reactivitat química. En la bibliografia tècnica consultada es descriuen esferes portadores d'alumina/magnèsia amb una densitat aparent d'empaquetament compresa entre 0,6 i $1,0 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ (referent a l'article [3]), equivalent a 600–1000 $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$. Per aquest motiu, el valor adoptat de $1000 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ queda inclòs dins del rang reportat i es considera adequat per representar, de manera simplificada, la densitat aparent del material inert utilitzat en el llit catalític.

Com a fluid refrigerant s'ha seleccionat el *Therminol 66*, un fluid tèrmic sintètic adequat per a aplicacions de transferència de calor a alta temperatura. Aquesta elecció és coherent amb les condicions d'operació del reactor, ja que presenta estabilitat tèrmica a temperatures elevades i permet retirar la calor de reacció de manera controlada. Segons la fitxa tècnica del producte [4], aquest pot operar fins a una temperatura màxima de massa de 345 °C i una temperatura màxima de pel·lícula de 375 °C, fet que el fa compatible amb l'interval tèrmic habitual del procés FORMOX.

En conjunt, el model desenvolupat permet descriure els aspectes principals del comportament del reactor multi tubular: la generació de calor associada a la reacció, la retirada de calor mitjançant el fluid refrigerant i l'efecte de la dilució del catalitzador en el control de temperatura. Així, els càlculs posteriors parteixen d'una configuració compatible amb la pràctica industrial del procés FORMOX i serveixen com a base per justificar les principals dimensions i condicions d'operació del reactor.

11.4.2 Cinètica de reacció

El primer pas a seguir per tal de determinar l'evolució del procés reactiu i dissenyar el reactor ha sigut determinar la cinètica del sistema. Aquesta, té un gran pes a l'hora de conèixer la velocitat a la qual els reactius es transformen en productes en qualsevol punt de l'equip.

L'Equació 13, és la cinètica escollida per representar-ho, que ha sigut extreta de l'article [5] i té la següent expressió:

$$r = k * P_{MeOH}^a * P_{O_2}^b * P_{H_2O}^c$$

On:

$$r = \text{velocitat de reacció} \left(\frac{\text{mol}}{\text{L} * \text{s}} \right)$$

k = constant cinètica

P_{MeOH} = pressió parcial de metanol (bar)

P_{O_2} = pressió parcial d'oxigen (bar)

P_{H_2O} = pressió parcial d'aigua (bar)

Del mateix article, s'ha obtingut el valor dels paràmetres “a”, “b” i “c”, els quals tenen un valor de 0.94, 0.10, -0.45, respectivament.

El següent repte per tal de completar i poder calcular la velocitat de reacció en qualsevol instant ha sigut trobar una constant de referència (k_0) universal utilitzada per diferents temperatures. Aquesta tasca s'ha completat trobant l'article [6] en el qual es proporcionen diferents processos experimentals que tenen com a resultat la velocitat de reacció per diferents temperatures en un procés FORMOX. A partir d'aquestes dades, és possible calcular la constant necessària vàlida

per un rang de temperatures entre 200 i 300 °C . Amb el valor obtingut, es calcula la constant del sistema treballat a les temperatures escollides a partir de l'Equació 14 (Arrhenius):

$$k = k_0 * e^{\left(\frac{-Ea}{R*T}\right)}$$

On:

k = constant cinètica

k_0 = constant de referència

Ea = energia d'activació

R = constant dels gasos $\left(\frac{atm * L}{mol * K}\right)$

T = temperatura (K)

L'article [5] permet conèixer que l'energia d'activació de la reacció en processos FORMOX compresos en els rangs condicionals treballats té un valor de 98000 J/mol i així acabar de completar les variables necessàries per determinar la constant del sistema.

Per últim, s'ha de calcular les pressions parcials de les espècies participants en la cinètica del procés. Aquests paràmetres es calculen a partir de l'Equació 15:

$$P_{i=\frac{Fi}{Ftot}*P}$$

On:

P_i = pressió parcial de l'espècie (bar)

F_i = cabal de l'espècie (mol/h)

F_{tot} = cabal total (mol/h)

P = pressió puntual (bar)

Un cop determinada la cinètica global de la reacció, es passa a aplicar l'efecte de la mescla catalítica. Com s'ha comentat anteriorment, el sistema catalític utilitzat és una mescla de catalitzador i inert amb diferent composició de catalitzador depenent de la zona del reactor on es treballi per tal de controlar la temperatura i evitar punts calents (*Hotspots*). A la pràctica, això es tradueix en un valor de fracció activa de catalitzador present a l'hora d'actuar en la velocitat de reacció, és a dir, quanta capacitat catalítica està actuant en comparació de la capacitat total de velocitat. A partir d'aquesta afirmació, la velocitat real observada en el procés de reacció ve determinada per l'Equació 16:

$$r_{act} = f_{act} * r$$

On:

r_{act} = velocitat de reacció activa $\left(\frac{mol}{L * s}\right)$

f_{act} = fracció de catalitzador activa

r = velocitat de reacció intrínseca ($\frac{mol}{L * s}$)

El sistema utilitzar per controlar aquesta fracció activa ha sigut programat a MATLAB i té la següent forma:

```
if w < 0.4
    f_act=0.2;
elseif w < 0.6
    f_act=0.45;
elseif w < 0.8
    f_act=0.5;
elseif w < 1
    f_act=0.65;
elseif w < 1.2
    f_act=0.81;
elseif w < 1.5
    f_act=0.91;
else
    f_act=1;
end
```

Figura 11.4.1. Control de l'activitat del catalitzador per zones

Com es pot observar, s'ha programat un sistema condicional per donar diferents valors a la fracció activa de catalitzador a cada zona. Clarament s'obté una progressió creixent del valor de la fracció a mesura que la massa de catalitzador creix amb l'objectiu d'evitar punts calents al principi del reactor. En aquest punt inicial és el moment ón hi ha més reactius frescos i un punt crític a l'hora de disparar-se la reacció, és per això que es busca tenir menys catalitzador en les primeres zones i anar creixent el seu valor a mesura que avança el procés. Es veu com a les darreres zones el valor de catalitzador és pràcticament unitari amb l'objectiu d'acabar de convertir els reactius desitjats i obtenir la conversió objectiu marcada a partir de la producció anual requerida.

11.4.3 Propietats locals

Seguidament, es presenten les propietats locals del sistema reactiu per tal de conèixer com es comporta el fluid i la seva repercussió en les propietats físiques i químiques d'aquest.

Per començar, es calcula el pes molecular del fluid reactiu. Aquest valor varia al llarg del tub a causa de la diferent composició i característiques fisicoquímiques. Sabent això, es pot confirmar que la variable es pot calcular a partir de l'Equació 17:

$$M_{mix} = \sum (F_i * M_g) / F_{tot}$$

On:

M_{mix} = pes molecular de la mescla (kg/kmol)

F_i = caudal de l'espècie ($\frac{kmol}{h}$)

M_g = pes molecular de l'espècie ($\frac{kg}{kmol}$)

F_{tot} = cabal total ($\frac{kmol}{h}$)

Per tal de determinar aquest valor, es necessita conèixer els pesos moleculars de cada espècie participada en el procés reactiu. Aquestes s'han obtingut bibliogràficament a partir de [7] i es mostren en la següent taula:

Taula 11.4.1. Pesos moleculars de les espècies

Espècie	Pes molecular (Kg/kmol)
Metanol	32
Oxigen	32
Nitrogen	18
Aigua	28
Formaldehid	30

Seguidament, es calcula la densitat del fluid. Aquest paràmetre també es variable i evoluciona al llarg del procés i es calcula amb l'Equació 18:

$$\rho_f = (P * M_{mix}) / (R * T)$$

On:

ρ_f = densitat del fluid ($\frac{kg}{m^3}$)

P = pressió (atm)

M_{mix} = pes molecular de la mescla ($\frac{kg}{kmol}$)

R = constant dels gasos ($\frac{atm * L}{mol * K}$)

T = temperatura (K)

Per últim, es busca determinar la velocitat superficial del gas. Aquesta variable és un paràmetre molt important a l'hora de determinar el sistema hidràulic i al dependre de variables evolutives en el sistema també obté un valor diferent en cada instant d'aquest. A l'hora de calcular-la, s'utilitzarà l'Equació 19 característica:

$$v_s = (F_{tot} * R * T) / (P * A_t)$$

On:

$$v_s = \text{velocitat superficial del gas } \left(\frac{m}{s}\right)$$

$$F_{tot} = \text{cabal total } \left(\frac{kmol}{h}\right)$$

$$R = \text{constant dels gasos } \left(\frac{atm * L}{mol * K}\right)$$

$$T = \text{temperatura (K)}$$

$$P = \text{pressió (atm)}$$

$$A_t = \text{àrea d'intercanvi (m}^2\text{)}$$

Per conèixer l'àrea d'intercanvi es realitzarà el següent càlcul (Equació 20):

$$A_t = \pi * \frac{d_t^2}{4}$$

On:

$$A_t = \text{àrea d'intercanvi (m}^2\text{)}$$

$$d_t = \text{diàmetre intern del tub (m)}$$

A partir de les dades recollides es calcula l'àrea de transferència:

$$A_t = \pi * \frac{0,0381^2}{4} = 0,00114 \text{ m}^2$$

A l'hora de completar aquesta operació es necessita saber el valor del diàmetre del tub utilitzat. En aquest cas, s'ha escollit treballar amb tubs d'acer inoxidable 316 d'1,5 polzades de diàmetre (0,0381 m) sustentant la informació de tubs utilitzats en processos FORMOX mencionada a l'article [8]. Aquest paràmetre permetrà afirmar el bon comportament hidràulic del sistema així com abastar totes les necessitats del procés tenint en compte les seves propietats físiques i químiques.

11.4.4 Balanços de matèria amb reacció química

Seguidament s'exposarà el balanç de matèria genèric aplicat en aquesta unitat reactiva (Equació 21).

$$E + G = A + S$$

On:

$$E = \text{entrada}$$

G = generació

A = acumulació

S = sortida

Aquest equip funciona en estat estacionari (EE) fet que permet afirmar que no hi ha acumulació ($A=0$).

$$E + G = S$$

Tenint aquesta assumpció en compte s'obté un balanç de matèria amb la següent forma (Equació 22):

$$\frac{dF_i}{dW} = r_{act} * \gamma_i$$

On:

F_i = cabal de l'espècie ($\frac{kmol}{h}$)

W = massa de catalitzador (kg)

r_{act} = velocitat de reacció activa ($\frac{mol}{L * s}$)

γ_i = coeficient estequiomètric de l'espècie

A partir d'aquest càlcul iteratiu mitjançant la simulació al programa utilitzat es tindrà l'opció de classificar i observar l'evolució de cada espècie present a la reacció per determinar diferents paràmetres importants del sistema de reacció així com el dimensionament del mateix equip. En aquest cas, s'ha escollit representar individualment l'evolució del cabal de metanol i s'ha obtingut el següent perfil:

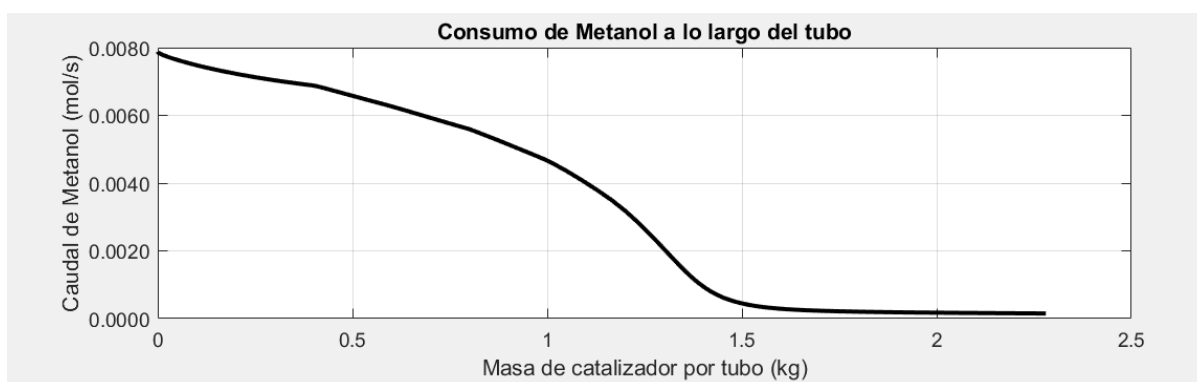


Figura 11.4.2. Perfil del cabal de metanol

Analitzant la Figura 11.4.2, es poden treure moltes conclusions del comportament de la reacció i el que succeeix dins de l'equip. Generalment, s'observa que, al parlar d'un reactiu, l'evolució del seu cabal al llarg de la massa catalítica pateix una disminució fins que arriba quasi al seu exhauriment. Aquesta disminució i diferència de cabal és el que determinarà la conversió que

s'obté d'aquesta espècie en l'equip seleccionat (explicat en l'*apartat 11.4.7*, posteriorment). Es pot apreciar com aquesta corba que representa el perfil del paràmetre estudiat no és totalment lineal, sinó que podem trobar diverses zones diferenciades amb comportaments dispars.

A l'inici del tub, entre 0 i 0,4 kg de catalitzador, el cabal de metanol disminueix moderadament. En aquesta zona obté una concentració elevada de metanol, de manera que la disponibilitat del reactiu és alta. Tot i això, el pendent no és excessivament pronunciat, fet que pot indicar que la reacció encara es troba en una etapa inicial dins del llit catalític, o bé que les condicions de temperatura i de contacte amb el catalitzador encara no han arribat a la zona de màxima activitat.

A partir d'uns 0,4 kg i fins aproximadament a 1,0 kg de catalitzador, la disminució del cabal és molt més notable. En aquest tram, el metanol comença a consumir-se significativament, passant de 0,0068 mol/s fins a aproximadament 0,0046 mol/s. Físicament, això es tradueix en que la reacció avança de manera més efectiva, ja que encara hi ha una gran part de metanol disponible i una activitat de catalitzador òptima.

La caiguda més pronunciada apareix entre 1,0 i 1,5 kg de catalitzador. En aquest interval, el cabal de metanol disminueix ràpidament, des d'uns 0,0046 mol/s fins a valors molt propers a zero. Aquesta part del gràfic és on es troba la zona de major consum de metanol dins del tub. En aquesta regió s'assoleix una combinació entre la disponibilitat de reactiu, la temperatura del sistema i l'activitat catalítica, fet que fa que la velocitat de reacció sigui elevada.

Finalment, a partir d'1,5 kg de catalitzador, el cabal de metanol es manté constant. Això indica que la major part del metanol ja s'ha consumit abans d'arribar al final del tub. En aquesta zona final, tot i que encara hi hagi catalitzador disponible, la quantitat de metanol restant és molt baixa, fet que es tradueix en que la velocitat de reacció disminueix considerablement. En aquest cas, el reactor deixa d'estar limitat per la quantitat de catalitzador i passa a estar limitat per la baixa concentració de reactiu.

En conclusió, com a resultat del perfil de metanol s'aconsegueix determinar el compliment del seu consum en el reactor del procés. Tot i no tenir un consum completament lineal i tenir diferents fases de la reacció s'aconsegueix la conversió desitjada i permet determinar i assegurar l'aprofitament i bon funcionament de l'equip dissenyat.

11.4.5 Balanços d'energia al reactor

Amb l'objectiu d'abastir la reacció i obtenir un entorn en les condicions desitjades per sistema exotèrmic, es plantegen els balanços d'energia del reactor tenint en compte el sistema de refrigeració utilitzar per obtenir unes condicions controlades. Aquestes condicions s'escullen per tal de no obtenir un pic de temperatura que pugui afectar al catalitzador ni obtenir reaccions secundàries indesitjades.

Primerament, s'exposa el balanç energètic de la zona reactiva (*Equació 23*). Aquesta equació té com a utilitat obtenir la temperatura de reacció (T) en funció de la massa de catalitzador (W). Aquesta variable és l'escollida per representar la variació de les variables d'interès del reactor.

$$\frac{dT}{dW} = \frac{(-\Delta H * r_{act}) + \left(\frac{4 * U}{dt * \rho b}\right) * (T_c - T)}{\sum F_i * C_{pi}}$$

On:

T = temperatura (k)

T_c = temperatura del refrigerant (k)

W = massa de catalitzador (kg)

ΔH = entalpia de reacció ($\frac{J}{mol}$)

r_{act} = velocitat de reacció activa ($\frac{mol}{L * s}$)

U = coeficient global de transeferència de matèria ($\frac{W}{m^2 * k}$)

dt = diàmetre dels tubs (m)

ρb = densitat del llit ($\frac{kg}{m^3}$)

F_i = cabal de l'espècie ($\frac{kmol}{h}$)

C_{pi} = capacitat calorífica de l'espècie ($\frac{J}{mol}$)

Per tal d'apropar a màxim la mescla a les condicions reactives òptimes s'ha decidit introduir aquesta al reactor amb una temperatura de 250°C ($T_{in}=250^\circ C$). Aquesta temperatura s'assoleix en els tractaments previs i permet començar el procés de reacció dins del rang desitjat.

També, s'ha determinat la temperatura d'entrada del fluid refrigerant. En aquest cas, s'ha buscat controlar la reacció i el seu caràcter força exotèrmic. Aquest atribut de la reacció fa que sigui primordial un intercanvi de calor òptim per no obtenir resultats incorrectes. Tenint en compte aquest punt crític s'ha escollit una temperatura d'entrada del refrigerant de 227 °C ($T_{Cin}=227^\circ C$).

Per tal de completar aquest balanç s'ha hagut de trobar la calor específica de cada espècie present en el sistema. Aquestes dades s'han trobat bibliogràficament a partir de l'article [9]. Seguidament, es mostra una taula amb els valors de "Cp" requerits:

Taula 11.4.2. Calors específics de les espècies

Espècie	Cp (J/mol)
Metanol	65,8
Oxigen	31,8
Nitrogen	30,5
Aigua	36,2
Formaldehid	48,5

Per altra banda, també s'ha de determinar un valor de "U" en les condicions de treball, referent a la nostra reacció i les substàncies implicades. Per realitzar aquesta identificació s'ha trobat l'article [1] en el qual s'ha trobat un valor experimental, comprovat i contrastat amb valors teòrics del procés FORMOX i s'ha treballat amb un valor de 135 W/(m²*K).

Per últim, a l'hora de tancar els valors bibliogràfics d'aquesta equació, s'ha trobat l'entalpia de reacció per un procés FORMOX convencional a partir l' article [7]. Es treballarà amb una entalpia de -156000 J/mol.

Per tal de controlar la temperatura de reacció es necessita un refrigerant que mantingui el rang de temperatures en condicions reactives no agressives. Això és molt important en aquest cas a causa del fort caràcter exotèrmic de l'oxidació de metanol.

El balanç energètic del fluid intercanviador (*Equació 24*) ve regit per la següent equació:

$$\frac{dT_c}{dW} = \frac{\left(\frac{4 * U}{dt * \rho b}\right) * (T_c - T)}{\sum mc * C_{pc}}$$

On:

T = temperatura (k)

T_c = temperatura del refrigerant (k)

W = massa de catalitzador (kg)

U = coeficient global de transeferència de matèria ($\frac{W}{m^2 * k}$)

dt = diàmetre dels tubs (m)

ρb = densitat del llit ($\frac{kg}{m^3}$)

mc = cabal de refrigerant ($\frac{kg}{s}$)

C_{pc} = capacitat calorífica del refrigerant ($\frac{J}{kg * k}$)

Amb l'objectiu de resoldre i analitzar el perfil de la temperatura del refrigerant s'utilitzen dades de calors específics de les espècies presents, valors de U, dimensions de tubs i característiques de la mescla catalítica mencionades anteriorment. Per altra banda, es determina el valor de calor específica (Cp) del refrigerant, trobat a partir de l'article [4] i s'escull un valor de cabal del corrent per aconseguir controlar la temperatura:

Taula 11.4.3. Calor específic i cabal del refrigerant

Cpc (J/kg*k)	2300
mc (kg/s)	152

Un cop exposades les equacions dels balanços utilitzades i determinades tant les variables bibliogràfiques com les variables característiques del sistema es segueix amb el procés de simulació dins de MATLAB. Aquest pas permet determinar gràficament el que passa dins del reactor i obtenir un perfil de temperatura en funció de la nostra variable controlada. El perfil de temperatura dona informació molt rellevant en el sistema com el pic màxim de temperatura o l'evolució de la velocitat de reacció, amb el qual es pot afirmar que és molt important per assegurar el compliment dels paràmetres desitjats en el predisseny i el posterior disseny de l'equip.

Seguidament, es mostra el gràfic del perfil de temperatures dins del reactor en funció de la massa de catalitzador:

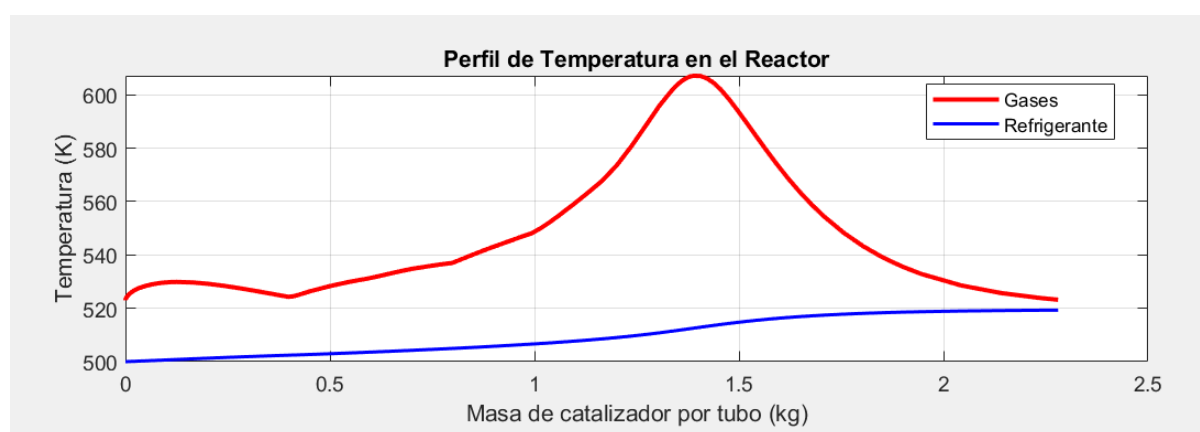


Figura 11.4.3. Perfil de temperatures al reactor

El perfil de temperatura obtingut és coherent amb el comportament esperable d'un reactor catalític refrigerat en una reacció molt exotèrmica. A l'entrada del llit, on la concentració de reactius és màxima, la velocitat de reacció i l'alliberament de calor també són més elevats i, per això, s'ha de controlar i refrigerar adequadament per mantenir les condicions desitjades. Posteriorment, s'observa que la temperatura del fluid augmenta ràpidament fins a assolir un màxim d'uns 607 K. Aquest màxim correspon al *Hotspot* del reactor i s'explica pel fet que, en aquest tram, la generació de calor és superior a la calor que encara s'ha pogut evacuar cap al refrigerant. A partir d'aquest punt, la concentració de reactius disminueix, la velocitat de reacció es va reduint i l'extracció de calor passa a dominar el balanç tèrmic, de manera que la temperatura del fluid tendeix a baixar progressivament. El fet que es presenti un únic pic i que aquest no continuï creixent al llarg del reactor indica un comportament tèrmic controlat. En les condicions de treball considerades, el valor màxim de 607 K queda prou allunyat de la temperatura a partir de la qual començarien a ser rellevants les reaccions secundàries, de manera que el pic observat es manté dins d'un marge acceptable d'operació.

La forma del perfil també reflecteix l'efecte del disseny del llit catalític per zones. Al començament del reactor interessa que la càrrega catalítica efectiva sigui menor, perquè és

justament on entra el reactiu fresc i on el risc d'augmentar l'activitat catalítica és més alt. Per aquest motiu, és raonable que l'activitat efectiva del catalitzador augmenti a mesura que s'avança pel reactor: així s'evita un *Hotspot* excessiu a l'entrada i, al mateix temps, es manté una activitat suficient en les zones posteriors, on la concentració de reactius ja ha disminuït. Paral·lelament, el refrigerant absorbeix la calor generada dins del reactor i la seva temperatura augmenta només de manera moderada, cosa que és compatible amb un intercanvi tèrmic efectiu si el seu cabal i la seva capacitat calorífica són els suficients.

En conjunt, el gràfic descriu un reactor tèrmicament ben resolt, amb una extracció de calor suficient per esmoreir el punt calent i amb una distribució del catalitzador que reparteix millor l'activitat al llarg del llit.

11.4.6 Pèrdua de pressió al reactor

Un altre dels paràmetres a controlar dins del reactor és l'evolució de la pressió al seu interior. Aquesta variació permet determinar la robustesa del procés de reacció trobant la diferència de pressió des de l'inici fins al final de l'equip. L'Equació 25 és utilitzada per tal de determinar la variació del paràmetre en el sistema:

$$\frac{dP}{dW} = - \frac{\frac{150 * (1 - e)^2 * \mu * v_s}{e^3 * dp^2} + \frac{1,75 * (1 - e) * \rho_f * v_s^2}{(e^3 * dp)}}{At * \rho_b}$$

On:

P = pressió (bar)

W = massa de catalitzador (kg)

e = porositat del llit

μ = viscositat (bar * s)

v_s = velocitat superficial del gas ($\frac{m}{s}$)

dp = diàmetre de partícula (m)

ρ_b = densitat del llit ($\frac{kg}{m^3}$)

ρ_f = densitat del fluid ($\frac{kg}{m^3}$)

At = àrea d'intercanvi (m^2)

Per tal de completar totes les variables i poder seguir l'evolució de la pressió al reactor s'ha hagut de determinar un nombre de valors referents a articles bibliogràfics o experimentals. Una de les decisions claus en el sistema en general ha sigut l'elecció del catalitzador, i en el cas de l'estudi de la pressió apareix directament relacionat amb l'equació principal en la qual apareixen vàries característiques referents al mateix. S'ha hagut de determinar la porositat, viscositat, densitat del llit i diàmetre de partícula. El valor de la densitat del llit s'ha explicat en l'*apartat 11.4.1*, el

valor de la porositat s'ha afirmat a partir de l'article [10], viscositat del llit s'ha referenciat a partir de l'article [11] i el diàmetre de partícula està dins del seu rang òptim segons l'article [3]. Seguidament es mostra una taula referent a les característiques del catalitzador utilitzades per determinar la pressió del sistema:

Taula 11.4.4. Propietats del llit

Porositat	0,45
Viscositat (Pa*s)	$2,5 \cdot 10^{-5}$
Densitat del llit (kg/m^3)	1000
Diàmetre de partícula (m)	0,007

Un cop determinats tots els paràmetres clau per obtenir els valors de pressió desitjat s'ha simulat el sistema obtenint un gràfic on es mostra l'evolució de la pressió del procés en funció de la massa de catalitzador present a cada tub i s'ha obtingut el següent resultat:

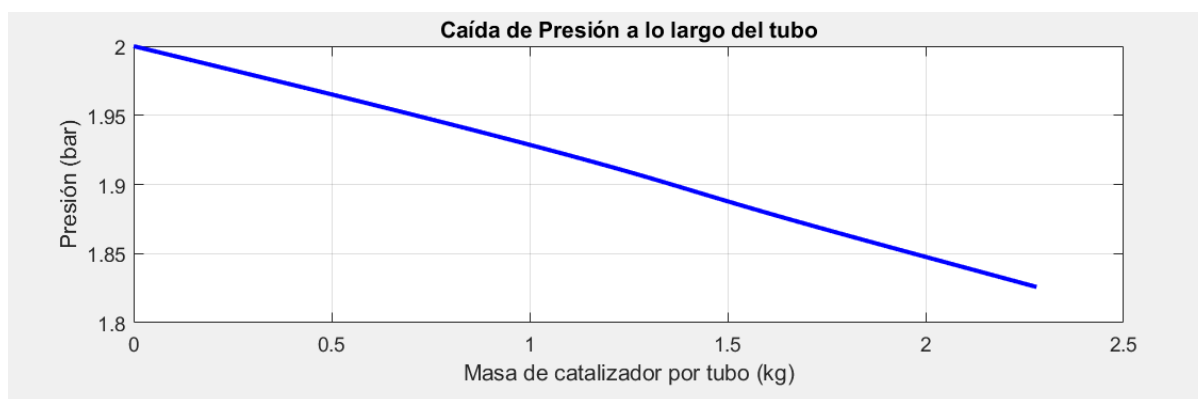


Figura 11.4.4. Perfil de pressió al reactor

Com es pot observar clarament, s'obté una pèrdua de pressió representada per una recta lineal decreixent, partint de la pressió inicial ($P_{in} = 2$ bar) i arribant fins a un valor a la sortida d'1,84 bar. Aquest fet ens permet afirmar que obtenim una pèrdua de pressió de 0,16 bar, valor raonable dins del context i condicions escollides.

Aquesta pèrdua de pressió es deu principalment al pas del gas a través del llit fix de catalitzador (Fe–Mo), que introdueix una resistència al flux. A nivell físic, el fluid ha de travessar els espais inter-particulars del llit, cosa que genera fricció i, en conseqüència, una dissipació d'energia en forma de caiguda de pressió. Al rang d'operació del reactor, on es treballa amb velocitats moderades i una mida de partícula relativament petita, tots dos termes contribueixen a la caiguda de pressió, encara que sense arribar a valors excessius.

A més, el disseny multitubular contribueix a limitar aquesta pèrdua de pressió. Dividint el cabal total en un gran nombre de tubs de petit diàmetre, es redueix la velocitat superficial del gas en cadascun, cosa que disminueix la caiguda de pressió respecte a un reactor d'un sol tub equivalent. Aquest aspecte és especialment rellevant en processos altament exotèrmics com el FORMOX, on es busca un bon control tèrmic sense penalitzar en excés el consum energètic associat al bombament o la compressió.

D'altra banda, les propietats del fluid també influeixen al perfil de pressió. A mesura que avança la reacció, es produeixen canvis en la composició i en la temperatura del gas, cosa que afecta la seva densitat i viscositat. En general, l'augment de temperatura tendeix a disminuir la densitat del gas, cosa que pot incrementar lleugerament la velocitat superficial i, per tant, la contribució a la pèrdua de càrrega. Tot i això, en aquest cas, aquests efectes no són prou significatius per generar una caiguda de pressió elevada.

En conjunt, una pèrdua de pressió de 0,16 bars representa aproximadament un 8% de la pressió d'entrada, la qual cosa es troba dins dels rangs típics per a reactors de llit fix en processos industrials. Referent al següent paper bibliogràfic, [12], es troba que habitualment els valors de pèrdua de pressió respecte de la pressió d'entrada són inferiors al 10–20%. Per tant, es pot considerar que el disseny proposat és adequat des del punt de vista hidràulic, ja que permet un bon compromís entre transferència de matèria, control tèrmic i consum energètic.

11.4.7 Conversió de reacció

A part de l'evolució de les variables d'interès per controlar el sistema, un dels valors més importants és la conversió de la reacció aconseguida dins de l'equip. Aquest càlcul permetrà determinar i tancar el balanç de matèria de l'equip així com conèixer tot el corrent de sortida per continuar calculant i dissenyant les unitats posteriors presents en el *downstream* del procés. Per tal de trobar la conversió de metanol s'utilitza els cabals d'entrada i sortida d'aquest. Aquests cabals són coneguts, ja que es sap el valor del cabal de cada un de les espècies presents com a resultat del balanç de matèria presentat anteriorment. L'Equació 26 utilitzada per determinar aquest paràmetre és la següent:

$$X_{MeOH} = \frac{F_{MeOHin} - F_{MeOHout}}{F_{MeOHin}} * 100$$

On:

X_{MeOH} = grau de conversió del metanol

F_{MeOHin} = cabal d'entrada de metanol ($\frac{kmol}{h}$)

$F_{MeOHout}$ = cabal de sortida de metanol ($\frac{kmol}{h}$)

Seguidament es calcula el valor mitjançant les dades obtingudes:

$$X_{MeOH} = \frac{158,743 - 3,174}{158,743} * 100 = 98,08\%$$

Un cop realitzat el càlcul, es troba que la conversió de metanol present en l'equip de reacció obté un valor de 98.08% . Aquest valor és l'escollit per treballar i buscat en la simulació del reactor per tal d'obtenir els cabals i balanços estimats en l'equip. A part, el mateix entra dins del rang normal utilitzat en processos FORMOX referent a l'article [5]. Aquesta conversió permetrà

obtenir una sortida del reactor adequada per facilitar el procés de *downstream* i poder controlar i assegurar el compliment i qualitat del producte final.

11.4.8 Dimensionament de l'equip

Sabent tot el que succeeix dins del reactor mitjançant l'evolució de les variables controlades es passa a calcular i dimensionar el reactor. Amb l'objectiu de trobar el valor de volum de reacció s'utilitza l'Equació 27 per trobar el volum de reacció en cada tub:

$$V_{REACTub} = \frac{W_{total}}{\rho b}$$

On:

$V_{REACTub}$ = volum de reacció per tub (m^3)

W_{total} = massa de catalitzador total (kg)

ρb = densitat del llit ($\frac{kg}{m^3}$)

Seguidament es realitza el càlcul a partir de les dades obtingudes:

$$V_{REACTub} = \frac{2,28}{1000} = 0,00228 m^3$$

El volum de reacció per tub té un valor de 0,00228 m³. A partir d'aquest fet, es calcula el volum total de reacció present a l'equip sabent el número de tubs utilitzats a partir de l'Equació 28:

$$V_{REAC} = V_{REACTub} * Nt$$

On:

V_{REAC} = volum de reacció total (m^3)

$V_{REACTub}$ = volum de reacció per tub (m^3)

Nt = número de tubs

A continuació es realitza el càlcul:

$$V_{REAC} = 0,00228 * 5600 = 12,77 m^3$$

Posteriorment, es resol l'equació anterior que permet afirmar que el volum de reacció total té un valor de 12,77 m³.

Un cop es calcula el valor del volum de reacció, el següent pas és calcular el volum de carcassa total de l'equip. Per tal de realitzar aquest càlcul, s'utilitza l'Equació 29:

$$V_c = \pi * \frac{Ds^2}{4} * Lt * \%sob$$

On:

$V_c = \text{volum total de l'equip (m}^3\text{)}$

$D_s = \text{diàmetre de carcassa (m)}$

$L_t = \text{longitud dels tubs (m)}$

$\%sob = \text{sobredimensionament}$

Seguidament es calcula el valor requerit:

$$V_c = \pi * \frac{4,73^2}{4} * 2 * 1,1 = 38,76 \text{ m}^3$$

Com es pot observar, per resoldre-la es requereix el valor de certs paràmetres independents del sistema com el sobredimensionament escollit. S'ha escollit utilitzar un valor d'aquest del 10% amb l'objectiu de poder abastir el sistema en casos de creixement i també tenint en compte la seguretat i viabilitat del procés referent a possibles desviacions.

S'escull el valor del diàmetre extern dels tubs, escollint un valor de gruix referent al procés i al diàmetre intern utilitzat i s'arriba a un valor de 0,0483 m que equival a 0,0051 m de gruix justificat a partir de l'article [13]. Seguidament, es planteja l'Equació 30 per tal de completar els càlculs secundaris:

$$Pitch = 1,25 * d_{ext}$$

On:

$d_{ext} = \text{diàmetre exterior dels tubs (m)}$

Es calcula el valor del Pitch:

$$Pitch = 1.25 * 0,0483 = 0,06 \text{ m}$$

Per continuar, es calcula el diàmetre de carcassa i el seu volum a partir de les Equacions 30 i 31:

$$D_s = Pitch * \sqrt{\frac{Nt}{0,91}}$$

On:

$D_s = \text{diàmetre de carcassa (m)}$

$Nt = \text{número de tubs}$

A continuació es realitza el càlcul per obtenir el diàmetre de la carcassa:

$$D_s = 0,06 * \sqrt{\frac{5600}{0,91}} = 4,73 \text{ m}$$

Sabent tots els valors utilitzats, es passa al càlcul d'aquest paràmetre d'interès i es troba que el valor del volum de carcassa total és de $38,76 \text{ m}^3$. Aquest no és un valor molt llunyà dels volums industrials en equips d'aquest estil, però posant en context el valor del diàmetre de carcassa es valora el compliment i possible operació real d'aquesta unitat. Calculant, es troba que el

diàmetre de carcassa necessari seria de 4,73 m. Aquest valor és un valor lleugerament gran i es podrien tenir problemes de transport en la instal·lació i posteriors dificultats de maniobra. Veient aquest fet, es decideix fer els procediments en dos equips idèntics en paral·lel i així obtenir els mateixos balanços i comportaments però amb dimensions més maniobrables. A part, dividir la producció en dos equips equivalents permetrà no aturar el procés davant de possibles avaries en algun dels efectius ja que si algun dels dos reactors pateix un inconvenient, es podrà continuar treballant al 50% i així no aturar la producció per complet. Sabent això, es calcula de nou les equacions anteriors mantenint el volum de reacció per tub (0,00228 m) però calculant el volum de reacció i de carcassa nous, afirmant que el nombre de tubs de cada reactor passa a ser de 2800. A partir d'aquest càlculs, es troba que el valor del volum de reacció de cada reactor passa a ser $6,38 \text{ m}^3$, el diàmetre de carcassa de cada reactor té un valor de 3,35 m i el volum total de cada equip és de $19,38 \text{ m}^3$.

11.4.9 Temps de residència

L'última variable d'interès calculada en el reactor és el temps de residència. Aquest càlcul es realitza de manera directa a partir de l'Equació 32:

$$\tau = \frac{V_{disp}}{Q_{vol}}$$

On:

τ = temps de residència (s)

V_{disp} = volum disponible (m^3)

Q_{vol} = cabal volumètric ($\frac{\text{m}^3}{\text{h}}$)

Es calcula el temps de residència a partir dels càlculs exposats posteriorment:

$$\tau = \frac{5,7465}{12,149} = 0,473 \text{ s}$$

Per tal de saber el cabal volumètric d'entrada s'utilitzen els valors coneguts de temperatura d'entrada ($T_{in} = 250 \text{ }^\circ\text{C}$) i el valor de la constant dels gasos ($R = 8,134 \text{ J/mol}\cdot\text{k}$) i es resol l'Equació 33:

$$Q_{vol} = \frac{\sum F_i * R * T_{in}}{P_{in}}$$

On:

Q_{vol} = cabal volumètric ($\frac{\text{m}^3}{\text{h}}$)

F_i = cabal de l'espècie ($\frac{\text{mol}}{\text{h}}$)

R = constant dels gasos ($\frac{\text{atm} * \text{L}}{\text{mol} * \text{k}}$)

T_{in} = temperatura d'entrada (K)

P_{in} = pressió d'entrada (atm)

A continuació es calcula el cabal volumètric a partir de les dades obtingudes:

$$Q_{vol} = \frac{(158743,2 + 388920,8 + 0 + 0 + 1463083,1) * 0,082 * 523}{2,2} = 12149 \frac{l}{h} = 12,149 \frac{m^3}{h}$$

També, es calcula el valor del volum disponible que té el gas per passar a partir del valor del volum de reacció (calculat anteriorment) i la porositat del llit, la qual adopta un valor de 0,45 a partir de la informació proporcionada per la font bibliogràfica [10] i utilitzant l'Equació 34:

$$V_{disp} = V_{REAC} * e$$

V_{disp} = volum disponible (m^3)

V_{REAC} = volum de reacció (m^3)

e = porositat del llit

Es calcula el volum disponible:

$$V_{disp} = 12,77 * 0,45 = 5,7465 m^3$$

Per últim, s'obté un temps de residència de 0,473 s. Aquest valor és completament raonable i dins dels valors típics de reaccions gasoses en reactor i processos com el triat referent a l'article [14].

11.4.10 Especificacions del reactor

Amb l'objectiu d'acabar de dissenyar i identificar el reactor, es calculen certs paràmetres per definir característiques alhora de la seva comanda i compra.

Primerament, es calcula la densitat a l'entrada i sortida dels tubs a partir de l'Equació 35:

$$\rho = \frac{P * PM}{R * T}$$

On:

ρ = densitat ($\frac{kg}{m^3}$)

P = pressió (kPa)

PM = pes molecular ($\frac{kg}{kmol}$)

R = constant dels gasos ($\frac{kPa * m^3}{kmol * K}$)

T = temperatura (K)

A partir dels valors de pesos moleculars calculats posteriorment es calculen les densitats a cada punt:

$$\rho_{tub,in} = \frac{200 * 29,028}{8,314 * 523} = 1,335 \text{ kg/m}^3$$

$$\rho_{tub,out} = \frac{184 * 28,012}{8,314 * 523,3} = 1,184 \text{ kg/m}^3$$

Per obtenir els valors necessaris per resoldre l'Equació 35, primer es necessita calcular el pes molecular mitjà de la mescla mitjançant l'Equació 36:

$$PM = \sum y_i * PM_i$$

On:

$$PM = \text{pes molecular} \left(\frac{\text{kg}}{\text{kmol}} \right)$$

$$y_i = \text{fracció molecular}$$

$$PM_i = \text{pes molecular de l'espècie} \left(\frac{\text{kg}}{\text{kmol}} \right)$$

Es calcula el pes molecular a cada punt i es troben els valors següents:

$$PM_{in} = 0,727 * 28 + 0,193 * 32 + 0,078 * 32 = 29,028 \text{ kg/kmol}$$

$$PM_{in} = 0,701 * 28 + 0,149 * 32 + 0,002 * 32 + 0,074 * 18 + 0,074 * 30 = 28,012 \text{ kg/kmol}$$

A continuació es calcula la viscositat tant de la part de la carcassa com de la dels tubs. Per realitzar-ho, obtenim els valors de la viscositat de la carcassa a partir de la referència [4] sabent el seu valor a diferents temperatures i fem el mateix per la part dels tubs sabent que l'excés d'aire serà el que predominarà en aquesta determinació:

Taula 11.4.5. Viscositats als tubs i carcassa

$\mu_{tub,in}(\text{mPa}\cdot\text{s})$	0,027
$\mu_{tub,out}(\text{mPa}\cdot\text{s})$	0,027
$\mu_{carcassa,in}(\text{mPa}\cdot\text{s})$	0,6781
$\mu_{carcassa,out}(\text{mPa}\cdot\text{s})$	0,5833

Es troba el valor del calor específic d'entrada i sortida de la part de la carcassa mitjançant la referència [4] (sabent la temperatura a cada punt):

Taula 11.4.6. Calors específics a la entrada i sortida de la carcassa

$Cp_{carcassa,in}(\text{kJ/kg}\cdot\text{K})$	2,291
$Cp_{carcassa,out}(\text{kJ/kg}\cdot\text{K})$	2,365

A continuació, es calcula el calor específic d'entrada i sortida dels tubs utilitzant l'Equació 37 per obtenir-ho:

$$Cp_{tub} = \sum y_i * Cp_i$$

$$Cp_{tub} = \text{calor específic del tub } \left(\frac{kJ}{kg * K} \right)$$

$$y_i = \text{fracció molecular}$$

$$Cp_i = \text{calor específic de l'espècie } \left(\frac{kJ}{kg * K} \right)$$

A continuació es presenta el càlcul per obtenir els calors específics:

$$Cp_{tub,in} = 0,727 * 30,5 + 0,193 * 31,8 + 0,078 * 65,8 = 1,11 kJ / (Kg * K)$$

$$Cp_{tub,out} = 0,701 * 30,5 + 0,149 * 31,8 + 0,002 * 65,8 + 0,074 * 36,2 + 0,074 * 48,5 \\ = 1,11 kJ / (Kg * K)$$

Per obtenir els valors de la conductivitat tècnica tant a l'entrada com a la sortida de la carcassa i dels tubs, s'interpola el seu valor mitjançant la referència [4] per la part de la carcassa i es troba el mateix per la part dels tubs coneixent la predominança de l'aire en el sistema:

Taula 11.4.7. Conductivitats tèrmiques als tubs i carcassa

$k_{tub,in} (W/m * K)$	0,044
$k_{tub,out} (W/m * K)$	0,045
$k_{carcassa,in} (W/m * K)$	0,1029
$k_{carcassa,out} (W/m * K)$	0,1008

Per calcular la velocitat de cada punt a les diferents parts del reactor, es calcula primer l'àrea del tub, l'àrea de pas i el caudal volumètric a partir de les Equacions 38, 39, 40 i 41 respectivament:

$$A_{tub} = \pi * \frac{Di^2}{4}$$

On:

$$A_{tub} = \text{àrea del tub } (m^2)$$

$$Di = \text{diàmetre intern del tub } (m)$$

$$A_{pas} = Nt * A_{tub}$$

On:

$A_{pas} = \text{àrea de pas (m}^2\text{)}$

$Nt = \text{número de tubs}$

$A_{tub} = \text{àrea del tub (m}^2\text{)}$

$$A_{lliure} = \frac{V_{carcassa}}{L}$$

On:

$A_{lliure} = \text{àrea carcassa lliure (m}^2\text{)}$

$V_{carcassa} = \text{volum intern de carcassa (m}^3\text{)}$

$L = \text{longitud (m)}$

$$Q = \frac{m}{\rho}$$

On:

$Q = \text{cabal volumètric (}\frac{\text{m}^3}{\text{h}}\text{)}$

$m = \text{cabal màssic (}\frac{\text{kg}}{\text{h}}\text{)}$

$\rho = \text{densitat (}\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\text{)}$

Es calcula i s'obtenen els següents valors:

$$A_{tub} = \pi * \frac{0,0381^2}{4} = 0,00114 \text{ m}^2$$

$$A_{pas} = 2800 * 0,00114 = 3,192 \text{ m}^2$$

$$A_{lliure} = \frac{9,336}{2,2} = 4,2435 \text{ m}^2$$

$$Q_{tub,in} = \frac{8,1274}{1,338} = 6,0737 \text{ m}^3/\text{s}$$

$$Q_{tub,out} = \frac{8,1274}{1,230} = 6,6057 \text{ m}^3/\text{s}$$

$$Q_{carcassa,in} = \frac{76}{865,1} = 0,08785 \text{ m}^3/\text{s}$$

$$Q_{tub,in} = \frac{76}{850,96} = 0,08931 \text{ m}^3/\text{s}$$

Un cop obtingut els valors corresponents es passa a calcular la velocitat a cada punt de l'equip a partir de l'Equació 42:

$$v_j = \frac{Q_j}{A_{pas}}$$

On:

$$v_j = \text{velocitat de pas} \left(\frac{m}{s} \right)$$

$$Q_j = \text{cabal volumètric} \left(\frac{m^3}{h} \right)$$

$$A_{pas} = \text{àrea de pas} (m^2)$$

A continuació, es mostra el càlcul d'aquesta variable:

$$v_{tub,in} = \frac{6,0737}{3,192} = 1,903 \text{ m/s}$$

$$v_{tub,out} = \frac{6,6057}{3,192} = 2,069 \text{ m/s}$$

$$v_{carcassa,in} = \frac{0,08785}{4,2435} = 0,0207 \text{ m/s}$$

$$v_{tub,in} = \frac{0,08931}{4,2435} = 0,021 \text{ m/s}$$

Seguidament, es calcula el calor total bescanviat per l'equip en la part tèrmica del mateix i es fa a partir de l'Equació 43:

$$Q = m * (h_{out} - h_{in})$$

$$Q = \text{calor bescanviat} (kW)$$

$$m = \text{cabal màssic} \left(\frac{kg}{s} \right)$$

$$h_{in} = \text{coeficient individual entrada} (kJ/kg)$$

$$h_{out} = \text{coeficient individual sortida} (kJ/kg)$$

Abans de poder calcular-la, s'obtenen els coeficients individuals d'intercanvi per cada una de les parts del reactor:

Taula 11.4.8 Coeficients individuals d'intercanvi de calor

$h_{in} (kJ/kg)$	454,63
$h_{out} (kJ/kg)$	499,57

Seguidament, es calcula el calor bescanviat sabent tots els paràmetres necessaris:

$$Q = 76 * (499,57 - 454,63) = 3415,3 \text{ kW}$$

Per calcular el volum intern dels tubs, s'utilitza l'Equació 44:

$$V_{tub,int} = Nt * \frac{\pi * D_{int}^2}{4} * L$$

On:

$V_{tub,int}$ = volum intern dels tubs (m^3)

Nt = número de tubs

D_{int} = diàmetre intern dels tubs (m)

L = longitud (m)

Es calcula el volum intern sabent els valors de l'equació esmentada:

$$V_{tub,int} = 2800 * \frac{\pi * 0,0381^2}{4} * 2,2 = 7,023 \text{ m}^3$$

Per altra banda, es calcula el volum intern de la carcassa obtenint abans el volum cilíndric de l'equip i el volum ocupat pels tubs a partir de les Equacions 45 i 46 respectivament:

$$V_{cil} = \frac{\pi * D_c^2}{4} * L$$

On:

V_{cil} = volum cilíndric (m^3)

D_c = diàmetre de carcassa (m)

L = longitud (m)

$$V_{tub,ext} = Nt * \frac{\pi * D_{ext}^2}{4} * L$$

On:

$V_{tub,ext}$ = volum extern dels tubs (m^3)

Nt = número de tubs

D_{ext} = diàmetre extern dels tubs (m)

L = longitud (m)

A continuació es realitza el càlcul de les equacions presentades

$$V_{cil} = \frac{\pi * 3,45^2}{4} * 2,2 = 20,608 \text{ m}^3$$

$$V_{tub,ext} = 2800 * \frac{\pi * 0,0483^2}{4} * 2,2 = 11,272 \text{ m}^3$$

Un cop trobats els valors necessaris, es passa a calcular el volum intern de la carcassa a partir de l'Equació 47:

$$V_{int,carcassa} = V_{cil} - V_{tub,ext}$$

On:

$$V_{int,carcassa} = \text{volum intern de la carcassa (m}^3\text{)}$$

$$V_{cil} = \text{volum cilíndric (m}^3\text{)}$$

$$V_{tub,ext} = \text{volum extern dels tubs (m}^3\text{)}$$

Seguidament, es mostra el càlcul del volum intern de la carcassa:

$$V_{int,carcassa} = 20,608 - 11,272 = 9,336$$

Per tal de trobar els valors de temperatures i pressions de disseny de l'equip, s'estima un marge de 20°C per la part de les temperatures en cada punt i un marge de 0,5 bar en el màxim operatiu de la zona dels tubs i el doble del valor operatiu en la part de la carcassa.

Taula 11.4.9 Temperatura i pressió de disseny de tubs i carcassa

Temperatura disseny tubs (°C)	353,9
Temperatura disseny carcassa (°C)	266,3
Pressió disseny tubs (bar)	2,5
Pressió disseny carcassa (bar)	3

Seguidament, es calcula el nombre de baffles necessaris per l'equip a partir del càlcul de l'espaiat mínim calculat mitjançant l'Equació 48 sabent que ha de complir la següent condició:

$$0,25 * Dc < Sb < Dc$$

$$Sb_{min} = 0,25 * Dc$$

On:

$$Sb_{min} = \text{espaiat mínim (m)}$$

$D_c = \text{diàmetre de carcassa (m)}$

Es calcula l'espaiat mínim de l'equip sabent el valor del seu diàmetre de carcassa:

$$S_{bmin} = 0,25 * 3,45 = 0,6909 \text{ m}$$

Es suposen 2 baffles per tal de comprovar si amb aquesta condició i es calcula l'espaiat que s'obtindrà en aquest cas amb l'Equació 49:

$$S_b = \frac{L}{N_{baffles} + 1}$$

On:

$S_b = \text{espaiat (m)}$

$L = \text{longitud (m)}$

$N_{baffles} = \text{Número de baffles}$

Es passa al càlcul de l'espaiat real que s'obtindrà amb 2 baffles:

$$S_b = \frac{2,2}{2 + 1} = 0,7333$$

$$0,7333 > 0,6909$$

Es comprova i s'afirma que el reactor tindrà 2 baffles per tal de complir amb les condicions d'espaiat i que el mateix valor serà l'oficial per aquest equip.

Per últim, es decideix donar un valor estàndard de tall de baffle obtenint aquest un valor de 25%.

11.4.11 Cubetes de retenció del reactor

Al'hora de calcular i especificar les seves dimensions s'ha de considerar el compliment de l'àrea total de l'equip. La cubeta ha de ser capaç de retenir tot el volum de Therminol 66 en cas de vessament ($V_{cubeta} \geq V_{int,carcassa}$). Aquest fet fa que el volum mínim de la cubeta sigui igual al volum intern de la carcassa. El volum de cada reactor s'ha calculat a l'apartat 11.4.10 i té un valor de $9,336 \text{ m}^3$.

Pel que fa a l'alçada de la cubeta, s'ha de complir amb uns límits per tal d'assegurar una correcta ventilació i una bona accessibilitat. S'escull treballar amb un valor d'1m d'alçada.

Per tal de calcular el volum de la cubeta s'utilitza l'Equació 50:

$$V_{cubeta} = C^2 * H$$

On:

$V_{cubeta} = \text{Volum de la cubeta (m}^3\text{)}$

$C = \text{constat de la cubeta (m)}$

$H = \text{altura de la cubeta (m)}$

Al conèixer el valor de l'alçada i escollir una disposició quadrada, es passa a calcular el valor dels costats de la cubeta aplicant un marge del 10% respecte el volum de l'equip.

$$9,336 * 1,1 = C^2 * 1 \Rightarrow C = 3,2 \text{ m}$$

Resolent tots els paràmetres, per a cada reactor, s'obtenen les dimensions presentades a la Taula 11.4.1:

Taula 11.4.10 Dimensions de les cubetes dels reactors

Volum intern carcassa (m^3)	9,336
Volum cubeta (m^3)	10,24
Costat cubeta (m)	3,2
Alçada cubeta (m)	1

11.4.12 Codi MATLAB

```
function disseny_react_dos_reactores
```

```
Tin=523; % k
```

```
Tcin=500; % k
```

```
% 1. Flujo total de la planta dividido entre 2 para simular UN reactor
```

```
Fin_planta = [44.1; 108.03; 1e-6; 0; 406.41]; % MeOH O2 H2O FORMALDEHIDO N2 (mol/s)
```

```
Fin_total = Fin_planta / 2; % Flujo de entrada para ESTE reactor
```

```
Pin=2*1e5; % Pa
```

```
U=135; % W/(m2*K)
```

```
dp=0.007; % m
```

```
gb= 1000; % Kg/m3
```

```
dt= 0.0381; % m equival a 1.5 polzades
```

```
Lt= 2; % m
```

```
% 2. Número de tubos dividido a la mitad (5600 / 2)
```

```
Nt=2800;
```

```
% Caudal por tubo
```

```
Fin=Fin_total/Nt;
```

% 3. Caudal de refrigerante total dividido a la mitad (152 / 2 = 76)

mc= 76/Nt; % Kg/s (por tubo)

Cpc= 2300; % J/Kg*K

e=0.45; % porosidad del lecho

AH=-156000; % J/mol

Ea=98000; % J/mol Energia activacion

M_g = [32; 32; 18; 30; 28] / 1000; % Pesos moleculares Kg/mol MeOH O2 H2O FORMALDEHIDO
N2

Cp=[65.8; 31.8; 36.2; 48.5; 30.5]; % J/mol [Metanol O2 H2O Formaldehido N2]

r_ref=2.24e-3; % mol/Kgcat*s

k_ref = r_ref/ (10^0.94 * 20^0.10 * 10^-0.45);

At = (pi * dt^2) / 4;

W_total = At * Lt * gb; % Massa total en Kg per tub

y0 = [Tin; Tcin; Fin; Pin];

visc = 2.5e-5; % Pa*s (viscositat gasos)

% Equacions diferencials

[w, s] = ode15s(@(w, s) funr(w, s, k_ref, Ea, AH, U, dt, gb, dp, e, Cp, M_g, mc, Cpc, At, visc), ...
[0, W_total], y0);

% EXTRACCIÓN DE DATOS Y GRÁFICAS

T_reactor = s(:, 1); % Columna 1: Temperatura

T_refrigerante = s(:,2); %Refrigerante Therminol 66

F_MeOH = s(:, 3); % Columna 3: Caudal de Metanol

P_reactor = s(:, 8); % Columna 8: Presión

% CÁLCULO DE LA CONVERSIÓN

X_MeOH = ((F_MeOH(1)- F_MeOH(end)) / F_MeOH(1)) * 100;

% RESULTADOS: 1 REACTOR

```
fprintf(' RESULTADOS PARA 1 REACTOR (DE 2 EN PARALELO)\n')
```

```
fprintf('Conversión de Metanol: %.2f %%\n', X_MeOH);
```

```
V_total_tubo = W_total / gb;
```

```
V_total_reaccion = V_total_tubo * Nt;
```

```
fprintf('Volumen de reacción: %.2f m3\n', V_total_reaccion);
```

```
d_ext = 0.0483; % metros
```

```
Pitch = 1.25 * d_ext;
```

```
Ds = Pitch * sqrt(Nt / 0.91); % Diámetro de la carcasa
```

```
fprintf('Diámetro de la carcasa: %.2f m\n', Ds);
```

```
V_carcasa = (pi * Ds^2 / 4) * (Lt); % Volumen del cuerpo cilíndrico
```

```
V_total_equipo = V_carcasa*1.10; % +10 % adicional
```

```
fprintf('Volumen total del equipo: %.2f m3\n', V_total_equipo);
```

% Tiempo de Residencia (tau)

```
R_gas = 8.314;
```

```
n_total_in = sum(Fin_total); % Flujo molar total a la entrada (mol/s)
```

```
Q_vol_in = (n_total_in * R_gas * Tin) / Pin; % Caudal volumétrico de entrada (m3/s)
```

```
V_huecos = V_total_reaccion * e; % Volumen vacío disponible para el gas (m3)
```

```
tau = V_huecos / Q_vol_in; % segundos
```

```
fprintf('Tiempo de residencia (tau): %.3f s\n', tau);
```

% RESULTADOS: PLANTA COMPLETA (LOS 2 REACTORES)

```
fprintf(' RESULTADOS GLOBALES DE LA PLANTA (2 REACTORES)\n');
```

```
fprintf('Conversión global de Metanol: %.2f %%\n', X_MeOH);
```

```
fprintf('Número total de tubos: %d\n', Nt * 2);
```

```
fprintf('Volumen total de reacción : %.2f m3\n', V_total_reaccion * 2);
```

```
fprintf('Volumen total de los equipos : %.2f m3\n', V_total_equipo * 2);
fprintf('Caudal total de refrigerante requerido: %.2f Kg/s\n', (mc * Nt) * 2);
```

% GRÁFICAS

```
figure('Name', 'Perfiles del Reactor en Paralelo', 'Position', [100, 100, 800, 800]);
```

% Gráfica 1: Temperatura del Reactor

```
subplot(3, 1, 1);
plot(w, T_reactor, 'r-', 'LineWidth', 2);
hold on
plot(w, T_refrigerante, 'b-', 'LineWidth', 1.5);
xlabel('Masa de catalizador por tubo (kg)');
ylabel('Temperatura (K)');
title('Perfil de Temperatura en el Reactor');
legend('Gases', 'Refrigerante', 'Location', 'best');
grid on;
```

% Gráfica 2: Caudal de Metanol

```
subplot(3, 1, 2);
plot(w, F_MeOH, 'k-', 'LineWidth', 2);
xlabel('Masa de catalizador por tubo (kg)');
ylabel('Caudal de Metanol (mol/s)');
title('Consumo de Metanol a lo largo del tubo');
grid on;
```

% Gráfica 3: Caída de Presión en Bares

```
subplot(3, 1, 3);
plot(w, P_reactor / 100000, 'b-', 'LineWidth', 2);
xlabel('Masa de catalizador por tubo (kg)');
ylabel('Presión (bar)');
```

```
title('Caída de Presión a lo largo del tubo');
```

```
grid on;
```

% ECUACIONES DIFERENCIALES

```
function dsdW = funr(w, s, k_ref, Ea, AH, U, dt, gb, dp, e, Cp, M_g, mc, Cpc, At, visc)
```

```
    T=s(1);
```

```
    Tc=s(2);
```

```
    F=s(3:7);
```

```
    P=s(8);
```

```
    Ftot = sum(F);
```

```
    R = 8.314;
```

% Control zonas catalizador

```
    if w < 0.4
```

```
        f_act=0.2;
```

```
    elseif w < 0.6
```

```
        f_act=0.45;
```

```
    elseif w < 0.8
```

```
        f_act=0.5;
```

```
    elseif w < 1
```

```
        f_act=0.65;
```

```
    elseif w < 1.2
```

```
        f_act=0.81;
```

```
    elseif w < 1.5
```

```
        f_act=0.91;
```

```
    else
```

```
        f_act=1;
```

```
    end
```

% 1. Propietats locals

$$M_{mix} = (F' * M_g) / F_{tot}; \% \text{ kg/mol}$$

$$g_f = (P * M_{mix}) / (R * T); \% \text{ kg/m}^3$$

$$u = (F_{tot} * R * T) / (P * A_t); \% \text{ m/s}$$

% 2. Cinètica no isotèrmica

$$k_{local} = k_{ref} * \exp((-E_a/R) * (1/T - 1/523.15));$$

$$P_{kPa} = (F ./ F_{tot}) .* (P/1000);$$

$$r = k_{local} * (\max(P_{kPa}(1), 1e-5)^{0.94}) * (\max(P_{kPa}(2), 1e-5)^{0.10}) * (\max(P_{kPa}(3), 1e-5)^{-0.45});$$

$$r_{act} = f_{act} * r;$$

$$dsdW = \text{zeros}(8, 1);$$

% Balanç de matèria

$$VN = [-1; -0.5; 1; 1; 0];$$

$$dsdW(3:7) = VN .* r_{act};$$

% Balanç d'energia

$$Q_{wall} = (4 * U / (dt * gb)) * (T_c - T);$$

$$\text{sumFCp} = F' * C_p;$$

$$dsdW(1) = ((-AH * r_{act}) + Q_{wall}) / \text{sumFCp};$$

% Balanç refrigerant

$$dsdW(2) = (-Q_{wall}) / (mc * C_{pc});$$

% Caiguda de pressió (Ergun)

$$\text{term}_{ergun} = (150 * (1-e)^2 * \text{visc} * u / (e^3 * dp^2) + 1.75 * (1-e) * g_f * u^2 / (e^3 * dp));$$

$$dsdW(8) = -(\text{term}_{ergun} / (A_t * gb)); \% \text{ Pa/kg}$$

end

end

11.5 Columna d'absorció

El procés consta d'una columna d'absorció que permet separar els components efluents dels reactors fins a l'obtenció del producte final, en aquest cas formaldehid al 37% en pes. Per al dimensionament d'aquesta unitat s'utilitza el simulador Aspen HYSYS, mitjançant una metodologia sistemàtica que es detalla a continuació prenent com a referència el disseny de la columna T-101.

Abans d'iniciar el dimensionament, es defineixen tots els compostos del procés en l'apartat *Properties*, dins de *Component Lists*. Posteriorment, es selecciona el paquet termodinàmic a l'apartat *Fluid Packages*. Atesa la naturalesa dels components implicats (metanol, aigua, oxigen, entre d'altres), s'empra el model NRTL, ja que ofereix una millor precisió per a aquest tipus de mescles.

11.5.1 Disseny rigorós de la columna d'absorció

Un cop es defineixen els compostos del procés i es selecciona el paquet termodinàmic, es procedeix a afegir la columna d'absorció en l'entorn de simulació d'Aspen HYSYS. A la *Figura 11.5.2*, s'observa la configuració de la columna CA-401 com a exemple.

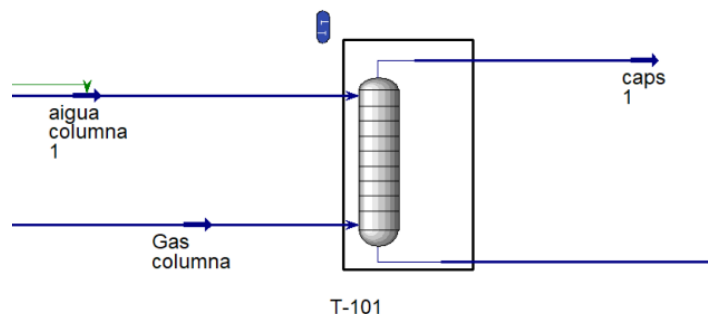


Figura 11.5.1. Vista de la columna d'absorció en el "Flowsheet Case"

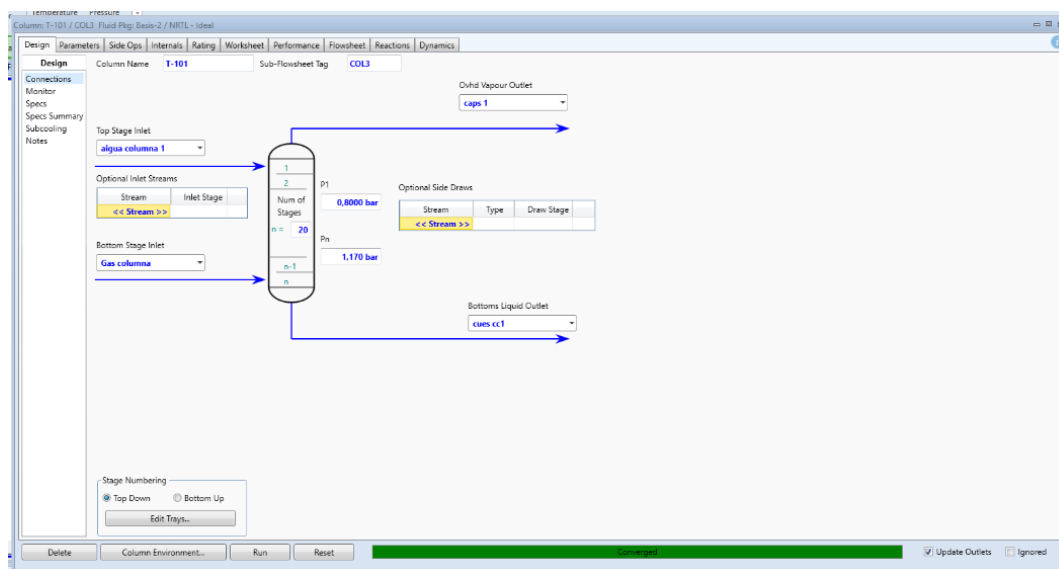


Figura 11.5.2. Apartat de connexions dins de la pestanya de disseny de la columna d'absorció

En primer lloc, s'especifiquen els corrents d'entrada, un dels quals, el gas columna, ve definit per la sortida dels reactors. També s'indica el nombre total d'etapes d'equilibri i la pressió d'aquesta a caps i cues. Amb això s'aconsegueix fer un disseny més definit de la torre.

Una vegada es defineixen aquestes especificacions, s'acciona el botó *Run* per comprovar la convergència de la columna. En cas que no convergeixi, cal variar lleugerament els paràmetres esmentats anteriorment fins a aconseguir-ho. Un cop assolida la convergència, es poden definir la resta de característiques de l'equip.

Per al procés d'obtenció de formaldehid, resulta més eficient l'ús d'una columna d'absorció de rebliment en lloc d'una de plats. Tal com es mostra a la *Figura 11.5.3*, per afegir aquest rebliment cal accedir a l'apartat *Internals* dins de la mateixa columna. En aquesta secció, se selecciona l'opció *packed* en lloc de *trayed* dins del camp *Internal Type* i posteriorment, es determina el tipus de rebliment concret a l'apartat *Packing Type*.

Per al disseny intern de la columna d'absorció, se selecciona el rebliment estructurat Mellapak 250Y (de la firma comercial *Sulzer*). Aquesta elecció es fonamenta en criteris tècnics, operatius i de seguretat de procés.

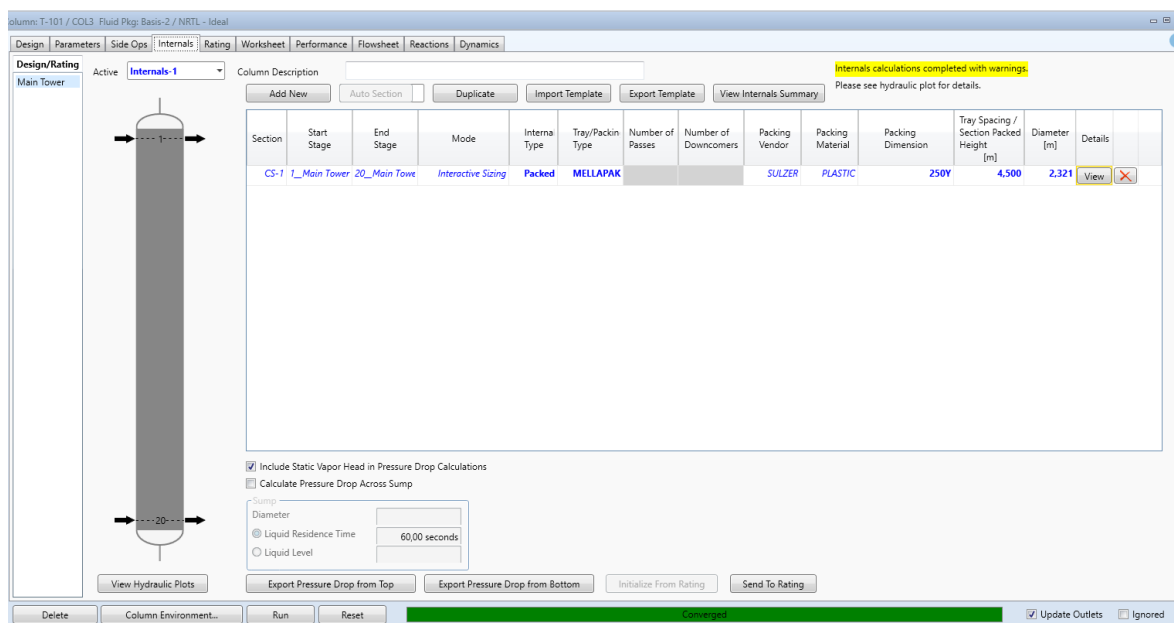


Figura 11.5.3 Apartat "internals" de la columna d'absorció

En aquesta imatge, s'observa un avís de color groc que indica la presència d'un possible error en la simulació. Per tal d'entendre a què fa referència aquesta advertència i poder-la solucionar, es clica el botó *View* i, posteriorment, *Messages*.

Com es mostra a la *Figura 11.5.4*, en aquest apartat es descriu la incidència de forma més detallada i concreta, fet que facilita la identificació de la variable o de l'especificació que genera el conflicte a la columna.

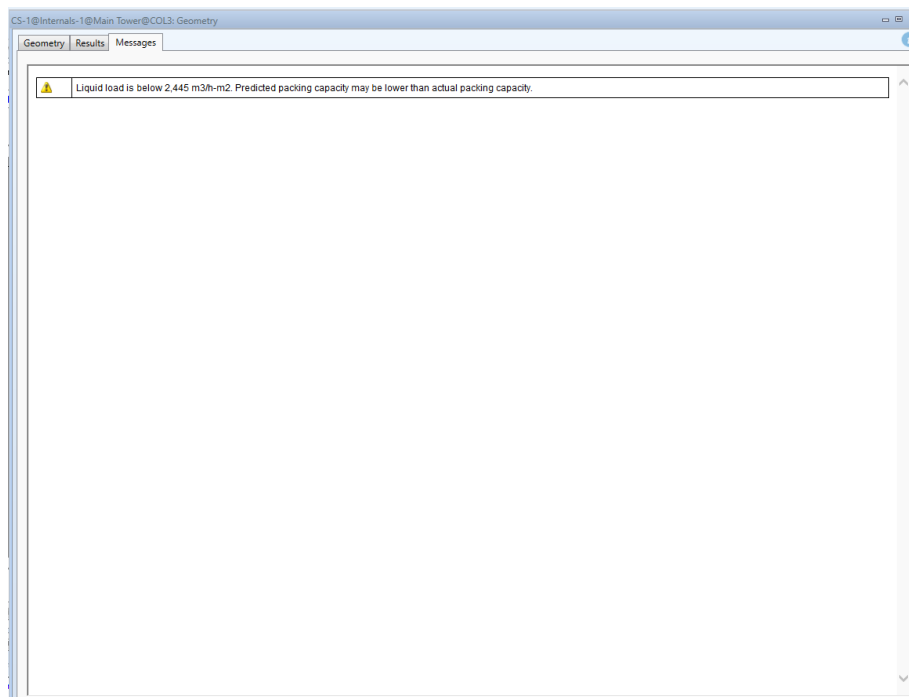


Figura 11.5.4. Missatge d'advertència de l'apartat de missatges de la columna d'absorció

Aquesta advertència indica que la càrrega de líquid es troba per sota del límit recomanat de $2,445 \text{ m}^3/(\text{h} \cdot \text{m}^2)$.

Aquest fenomen es produeix a causa de la naturalesa del procés d'obtenció de formaldehid, on es fa servir un cabal molt elevat de fase gasosa en comparació amb el baix cabal de solvent (aigua) necessari per a l'absorció. Per tal d'evitar l'ofegament de la columna provocat pel pas del gas, es requereix un diàmetre de columna de 2,1 m. No obstant això, aquesta àrea transversal tan àmplia provoca que el baix cabal de líquid disponible sigui insuficient per mullar el reblliment de manera natural per gravetat. Això genera un risc elevat de zones seques, fet que reduiria l'eficiència real de la columna.

Per solucionar aquesta limitació sense comprometre la viabilitat operativa de la unitat (ja que una reducció del diàmetre la inundaria), es prescriu la instal·lació d'un distribuïdor de líquid d'alta eficiència de tipus *spray* a la part superior de la columna. Aquest dispositiu mecànic assegura la polvorització homogènia de l'aigua en gotes fines sobre la totalitat de la secció transversal del Mellapak 250Y. D'aquesta manera, es garanteix el mullat complet de la superfície de contacte, es corregeix l'efecte de la baixa càrrega de líquid i es manté l'eficiència de transferència de matèria predita pel simulador.

Finalment, per consultar l'alçada i el diàmetre obtinguts per a la columna d'absorció, cal accedir a la pestanya *Performance* i, posteriorment, seleccionar *Internals Results* des de la finestra que es mostra a la Figura 11.5.2.

En aquest apartat, tal com es veu a la Figura 11.5.5, es poden observar altres dades de disseny de la columna.

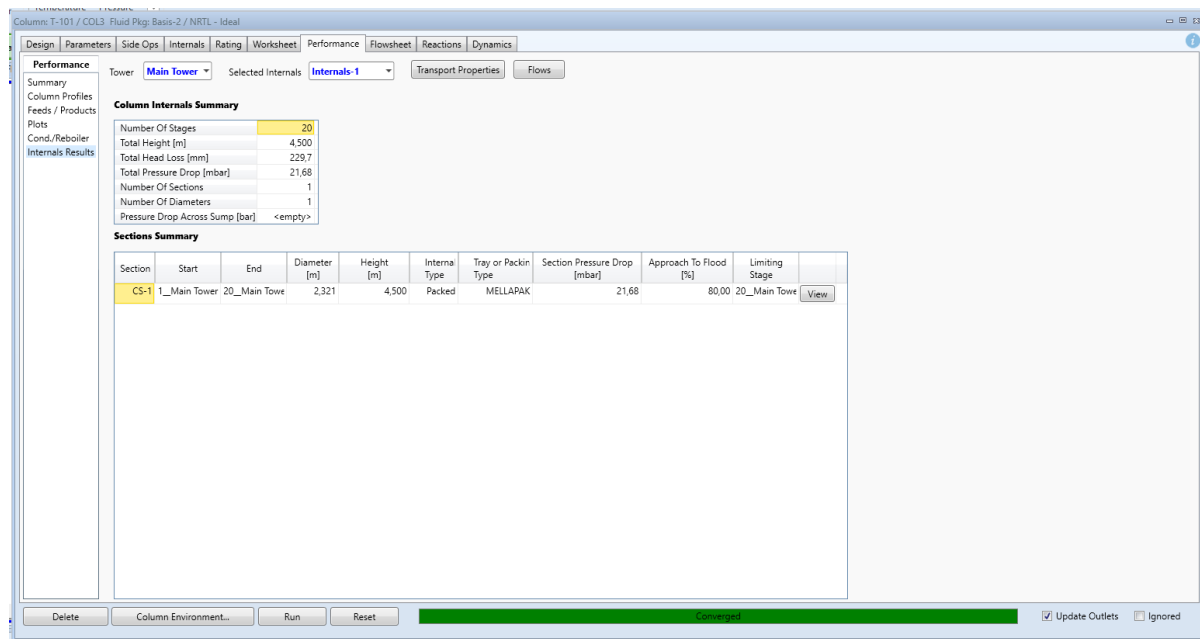


Figura 11.5.5. Apartat d'Internals Results de la Columna d'absorció

Es confirma que la simulació és correcta i que no es presenta cap inconvenient quan tots els corrents convergeixen i es mostren de color blau fosc. En cas que algun corrent aparegui de color blau cel, cal revisar-ne les especificacions i determinar quines variables s'han de modificar per tal de corregir la simulació.

A la Taula 11.5.1, es presenta un resum amb les condicions d'operació més destacades de la columna d'absorció.

Taula 11.5.1. Condicions d'operació més destacades de la columna d'absorció

Columna	Pressió caps (bar)	Temperatura caps (°C)	Pressió cues (bar)	Temperatura cues (°C)
T-101	0,8	45,54	1,17	55,91

11.5.2 Aplicació del codi ASME al disseny de la columna d'absorció

Una vegada s'utilitza el programa Aspen HYSYS per obtenir les dades de procés de la columna, es prossegueix amb l'aplicació del codi ASME (concretament la Secció VIII, Divisió 1). Aquesta normativa permet determinar altres paràmetres de disseny mecànic de l'equip, com ara el gruix necessari de les parets del cos cilíndric. Atès que una columna d'absorció es classifica com un recipient cilíndric a pressió, l'aplicació d'aquest codi garanteix un dimensionament estructuralment resistent i segur per a l'operació.

El material seleccionat per a la construcció de la columna d'absorció és l'acer inoxidable AISI 316L. Aquesta elecció es justifica pel fet que es treballa amb formaldehid en medi aquós, una

substància amb tendència a oxidar-se i generar àcid fòrmic. Atès que aquest subproducte és altament corrosiu, l'ús d'aquest acer, que destaca per la seva gran resistència a la corrosió química, resulta indispensable per tal d'assegurar la màxima seguretat operativa i durabilitat de la planta.

D'altra banda, és necessari determinar la pressió i la temperatura de disseny de la columna d'absorció. Per començar, es calcula la pressió de disseny a partir de l'Equació 51. Per al seu càlcul, es pren com a referència la pressió d'operació més alta de la columna, la qual cosa permet un sobredimensionament de l'equip. Aquesta pressió es localitza al *Flow Sheet* de la simulació, accedint a les especificacions de la columna d'absorció i consultant el valor corresponent a la pressió de cues, atès que és superior a la de caps.

La pressió d'operació obtinguda a cues és d'1,17 bar (pressió absoluta). En restar-li la pressió atmosfèrica (1,013 bar), s'obté la pressió manomètrica equivalent de 0,157 bar(g), valor necessari per a l'aplicació de la Taula 11.5.2. i el posterior càlcul de la pressió de disseny final.

Taula 11.5.2. Mostra com es calcula la pressió de disseny d'un equip en funció de la seva pressió d'operació màxima

Pressió d'operació màxima (barg)	Pressió de disseny (barg)
0-35	Pressió d'operació màxima + 3,5 bar
35-70	Pressió d'operació màxima + 10%
70-200	Pressió d'operació màxima + 8,5 % però mínim 7 bar i màxim 10 bar
200-	Pressió d'operació màxima + 5%

Atès que la pressió d'operació màxima a la columna d'absorció és de 0,157 bar(g), es fa servir l'Equació 51 per al càlcul de la seva pressió de disseny:

$$Pd = Po, max + 3,5$$

On:

$$Pd = \text{Pressió de disseny (barg)}$$

$$Po, max = \text{Pressió d'operació màxima (barg)}$$

Utilitzant les dades de la columna d'absorció, l'equació queda de la següent forma:

$$Pd = 0,157 + 3,5 = 3,657 \text{ bar(g)} = 4,67 \text{ bar}$$

En segon lloc, es calcula la temperatura de disseny d'aquesta columna a partir de l'Equació 52. Igual que en el cas de la pressió, es pren com a referència la temperatura d'operació més elevada de la torre. Per conèixer aquest valor, s'accedeix novament al *Flow Sheet* de la simulació i es consulta la temperatura de cues de la columna.

La temperatura d'operació obtinguda és de 78,35 °C. A partir d'aquest valor, i mitjançant l'aplicació de l'Equació 52, es determina la temperatura de disseny final de l'equip.

$$Td = To, max + 20^{\circ}C$$

On:

$T_d = \text{Temperatura de disseny } (^{\circ}\text{C})$

$T_{o, \max} = \text{Temperatura d'operació màxima } (^{\circ}\text{C})$

Utilitzant les dades de la columna d'absorció, l'equació queda de la següent forma:

$$T_d = 78,35 + 20^{\circ}\text{C} = 98,35^{\circ}\text{C}$$

Un cop calculats els valors de la pressió i la temperatura de disseny de la columna d'absorció, es prossegueix amb el càlcul del gruix del cos cilíndric d'aquesta.

Per dur a terme aquest càlcul, es fa servir l'Equació 3. Per a la seva resolució es disposa de totes les variables necessàries, a excepció de l'esforç admissible del material (S) i de l'eficiència de la soldadura (E).

Per tal de determinar el valor de l'esforç admissible del material, es consulta el codi ASME (concretament la Secció II, Part D) [17]. Aquest paràmetre depèn directament del material seleccionat i de la temperatura de disseny de l'equip. Prenent aquestes dues variables com a referència, el valor de S corresponent és de 115 MPa equivalent a 1150 bar.

En segon lloc, es determina el factor d'eficiència de la soldadura d'acord amb el codi ASME (Secció VIII, Divisió 1) [16]. Per al disseny d'aquesta columna, s'opta per un valor de 0.85, el qual correspon a un examen radiogràfic per punts (*Spot Radiography*). Aquesta elecció es fonamenta en el fet que constitueix l'estàndard industrial per a equips que no operen en serveis letals ni a pressions extremes. D'aquesta manera, es garanteix la integritat estructural de la torre segons la normativa vigent sense incórrer en sobre costos de fabricació i inspecció innecessaris.

Un cop es determinen aquests paràmetres, es pot aplicar l'Equació 3 per concloure amb el càlcul del gruix de la columna.

$$t = \frac{4,67 \text{ bar} \cdot 1,16 \text{ m}}{1150 \text{ bar} \cdot 0,85 - 4,67 \text{ bar}} = 0,005568 \text{ m} = 5,57 \text{ mm}$$

Seguidament, es determinen els paràmetres referents als fons de la columna d'absorció, on s'opta per l'ús de capçals el·lipsoïdals 2:1.

Aquesta elecció es justifica principalment perquè aquesta geometria permet que el gruix necessari per a les tapes sigui pràcticament idèntic al del cos cilíndric (virola). Com a conseqüència, es facilita el procés de fabricació i es simplifiquen les unions soldades en evitar canvis bruscos de gruix.

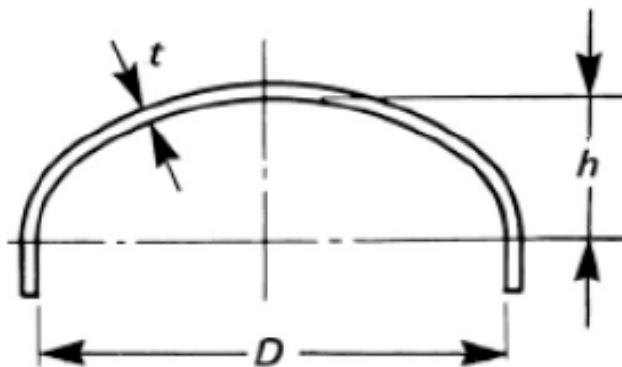


Figura 11.5.6. Representació d'un fons El·lipsoidal 2:1

L'Equació 53 permet calcular el gruix dels fons el·lipsoidals.

$$td = \frac{P * D}{2 * S * E - 0.2 * P}$$

On:

P = pressió de disseny (bar)

D = diàmetre de la columna d'absorció (m)

S = Esforç admissible del material (bar)

E = Eficiència de la soldadura

Mitjançant les dades de la columna d'absorció, l'equació es desenvolupa de la següent manera:

$$t = \frac{4,67 * 2,321}{2 * 1150 * 0,85 - 0.2 * 4,67} = 0,005547 \text{ m} = 5,55 \text{ mm}$$

Tal com s'ha indicat anteriorment, el gruix del fons obtingut és pràcticament idèntic al gruix de la virola, havent-hi una diferència entre aquests dos de 0,02m.

A continuació, es determina l'alçada total de la columna d'absorció. Per una banda, l'alçada del cos cilíndric s'obté directament mitjançant la simulació de l'equip a Aspen HYSYS, aquest valor es localitza a la Figura 11.5.5. Per altra banda, cal calcular l'alçada corresponent als capçals de la columna, la qual es determina a partir de l'Equació 54.

$$h \text{ capçals} = \frac{D}{4}$$

Utilitzant les dades de la columna d'absorció, l'equació queda de la següent forma:

$$h \text{ capçals} = \frac{2,321 \text{ m}}{4} = 0,58 \text{ m}$$

Un cop definida l'alçada dels capçals, cal determinar la pestanya recta o *Straight Flange* (SF) abans de calcular l'alçada total de la columna. Aquesta prolongació cilíndrica del fons és fonamental per allunyar la línia de soldadura de la zona de curvatura, on les concentracions de tensions mecàniques són més elevades.

D'aquesta manera, situant la unió en una zona de paret recta, es garanteix una major integritat mecànica de l'equip i es facilita l'acoblament i l'alineació amb la virola. Per a aquest disseny, se selecciona un SF de 50 mm, d'acord amb els estàndards habituals de fabricació de recipients a pressió.

Així mateix, també cal tenir en compte un espai lliure determinat tant per damunt com per sota del llit de rebliment. A la part superior, es requereix un marge d'aproximadament 0,6 m per a l'allotjament del distribuïdor de líquid d'alta eficiència de tipus *spray* i del demister, dispositiu que evita l'arrossegament de gotes de líquid per part del corrent gasós ascendent. D'altra banda, a la part inferior es deixa un espai d'uns 1,2 m, el qual resulta necessari per a encabir l'estructura de suport del rebliment i per a disposar d'un volum de retenció de seguretat on el líquid s'acumula abans de la seva sortida pel fons.

Un cop definit el paràmetre SF, i determinar els espais requerits a la part superior i inferior del llit, es calcula l'alçada total de la columna d'absorció mitjançant l'aplicació de l'Equació 55.

$$h \text{ columna} = L + 2 * (h \text{ capçals} + SF) + \text{espai superior} + \text{espai inferior}$$

On:

L = Longitud del llit de rebliment (m)

$h \text{ capçals}$ = alçada dels capçals de la columna (m)

SF = straight flange (m)

espai superior = espai necessari per damunt del llit (m)

espai inferior = espai necessari per sota del llit (m)

A partir de les dades calculades prèviament, l'alçada total de la columna és la següent:

$$h \text{ columna} = 4,5 + 2 * (0,58 + 0,05) + 0,6 + 1,2 = 7,56 \text{ m}$$

Un cop calculades les alçades de la virola i dels capçals, es continua amb el càlcul del volum intern de la columna per tal de conèixer la capacitat total de l'equip. Aquest càlcul del volum intern es duu a terme a partir de l'Equació 56.

$$V \text{ intern columna} = V_i \text{ virola} + 2 * V_i \text{ capçals}$$

On:

$V_i \text{ virola}$ = Volum intern de la virola (m^3)

$V_i \text{ capçals}$ = Volum intern dels capçals (m^3)

Abans de poder realitzar aquest càlcul, cal determinar el volum de la virola i el dels capçals (tenint en compte en aquests últims el SF esmentat anteriorment) a partir de l'Equació 57 i l'Equació 58.

$$Vi \text{ virola} = \frac{\pi}{4} * Di^2 * h \text{ virola}$$

On:

Di = Diametre intern de la columna (m)

$h \text{ virola}$ = Alçada de la virola (m)

$$Vi \text{ capçals} = \frac{\pi * Di^3}{24} + \frac{\pi * Di^2}{4} * SF$$

On:

Di = Diametre intern de la columna (m)

SF = straight flange (m)

Un cop definides totes les equacions per al càlcul del volum intern de la columna, es procedeix a realitzar les operacions corresponents:

$$Vi \text{ virola} = \frac{\pi}{4} * 2,321^2 * 6,3 = 26,66 \text{ m}^3$$

$$Vi \text{ capçals} = \frac{\pi * 2,321^3}{24} + \frac{\pi * 2,321^2}{4} * 0,05 = 1,85 \text{ m}^3$$

$$V \text{ intern columna} = 26,66 + 2 * 1,85 = 30,36 \text{ m}^3$$

Una vegada es coneix el volum intern de la columna, es prossegueix amb el càlcul del volum extern per tal de determinar l'espai real que ocuparà l'equip a la planta. Les expressions matemàtiques utilitzades per a aquesta determinació són les Equacions 56, 57 i 58, no obstant això, en lloc d'emprar el diàmetre intern, aquestes operacions es realitzen a partir del diàmetre extern, el qual es calcula mitjançant l'Equació 59.

$$De = Di + 2 * t$$

On:

Di = Diametre intern de la columna (m)

t = gruix equip (m)

Per a l'aplicació d'aquesta fórmula, el diàmetre intern s'obté de la simulació a Aspen HYSYS, mentre que per al gruix s'empra el valor nominal de 8 mm. Tot i que els valors estrictes de càlcul per a la virola i els capçals són de 5,57 mm i 5,55 mm respectivament, s'opta per aquesta dimensió superior basant-se en criteris de seguretat, fabricació i normativa.

Aquesta decisió es justifica, en primer lloc, per la necessitat d'incloure un sobre gruix per corrosió d'entre 1,5 i 2 mm, marge indispensable per compensar el possible desgast del material a causa del contacte amb el formaldehid durant la seva vida útil. En segon lloc, la tria respon a la disponibilitat de planxes comercials estàndard; el gruix de 8 mm és la mida comercial superior immediata que cobreix tant el gruix de disseny com les toleràncies de laminació.

Finalment, la unificació del gruix en tot el recipient facilita l'alineació de les juntes soldades, simplifica el procés constructiu i augmenta la rigidesa estructural del conjunt. Un cop establerts aquests paràmetres, s'aplica l'equació següent:

$$De = 2,321 + 2 * 0,008 = 2,337 \text{ m}$$

Un cop determinat el diàmetre extern, es procedeix a realitzar les operacions corresponents:

$$Ve \text{ virola} = \frac{\pi}{4} * 2,337^2 * 6,3 = 27,02 \text{ m}^3$$

$$Ve \text{ capçals} = \frac{\pi * 2,337^3}{24} + \frac{\pi * 2,337^2}{4} * 0,05 = 1,89 \text{ m}^3$$

$$V \text{ extern columna} = 27,02 + 2 * 1,89 = 30,8 \text{ m}^3$$

A banda dels volums de la columna, també cal fer-ne un càlcul del volum de les parets. Per tal de dur a terme aquest càlcul, s'utilitza l'Equació 60.

$$V \text{ paret} = A \text{ total} * t \text{ nom}$$

On:

$$A \text{ total} = \text{Àrea total de paret (m}^2\text{)}$$

$$t = \text{gruix nominal (m)}$$

Prèviament al càlcul d'aquesta equació, és necessari determinar l'àrea de la paret de la virola i la dels capçals mitjançant les Equacions 61 i 62, per tal d'obtenir l'àrea total de la paret de la columna a partir de l'Equació 63.

$$A \text{ paret virola} = \pi * Di * L$$

On:

$$Di = \text{Diàmetre intern de la columna (m)}$$

$$L = \text{Alçada de la virola (m)}$$

$$A \text{ paret capçal} = 1,084 * Di^2 + (\pi * Di * SF)$$

On:

Di = Diametre intern de la columna (m)

SF = straight flange (m)

$$A_{total paret} = A_{paret virola} + 2 * A_{paret capçal}$$

Un cop definides les expressions matemàtiques, es procedeix a la resolució d'aquestes a partir de les dades de la columna d'absorció:

$$A_{paret virola} = \pi * 2,321 * 6,3 = 45,94 \text{ m}^2$$

$$A_{paret capçal} = 1,084 * 2,321^2 + (\pi * 2,321 * 0,05) = 6,20 \text{ m}^2$$

$$A_{total paret} = 45,94 + 2 * 6,20 = 58,34 \text{ m}^2$$

Posteriorment, es determina el volum de la paret:

$$V_{paret} = 58,34 * 0,008 = 0,47 \text{ m}^3$$

Finalment, cal determinar el pes de la columna, tant quan és buida, com quan està en operació i plena d'aigua.

Per a l'estimació del pes en buit s'utilitza l'Equació 64. Atès que es tracta d'una columna vertical d'altura considerable, l'estructura no es recolza directament sobre el terra i, per tant, cal addicionar el pes del faldó de suport al pes del cos principal (virola i capçals). Així mateix, s'aplica un factor d'ampliació d'entre el 10% i el 15% en concepte d'accessoris.

$$Pes_{columna buida} = (Pes_{base} + Pes_{faldó}) * 1,15$$

On:

Pes_{base} = Pes de la virola i el pes dels capçals (Kg)

$Pes_{faldó}$ = Pes del faldó de suport

Per a la resolució d'aquesta equació, es requereix el càlcul previ del pes de la base i del faldó mitjançant les Equacions 65 i 66.

$$Pes_{base} = V_{paret} * \rho_{material}$$

On:

V_{paret} = Volum de la paret de la columna (m^3)

$\rho_{material}$ = densitat del acer inoxidable 316 L ($\frac{\text{Kg}}{\text{m}^3}$)

$$Pes \text{ faldó} = V \text{ faldó} * \rho \text{ material}$$

On:

$$V \text{ paret} = \text{Volum del faldó} (m^3)$$

$$\rho \text{ material} = \text{densitat del acer al carboni} \left(\frac{Kg}{m^3} \right)$$

Considerant que el faldó presenta la mateixa secció que la virola, però amb una alçada de 2 m en lloc de 6.3 m, es desenvolupen els càlculs següents:

$$Pes \text{ base} = 0,47 * 8000 = 3760 \text{ Kg}$$

$$Pes \text{ faldó} = 0,12 * 7850 = 942 \text{ Kg}$$

$$Pes \text{ columna buida} = (3760 + 942) * 1,15 = 5407,3 \text{ Kg}$$

Un cop determinat el pes de la columna en buit, es procedeix a calcular-ne el pes en condicions d'operació i saturada d'aigua. Per a aquests darrers càlculs s'empren les Equacions 67 i 68.

$$Pes \text{ columna operació} = Pes \text{ buit} + Pes \text{ rebliment} + Pes \text{ líquid}$$

On:

$$Pes \text{ buit} = Pes \text{ de la columna buida} (Kg)$$

$$Pes \text{ rebliment} = Pes \text{ del rebliment de la columna} (Kg)$$

$$Pes \text{ líquid} = Pes \text{ del líquid que hi ha en la columna durant l'operació} (Kg)$$

$$Pes \text{ columna plena d'aigua} = Pes \text{ buit} + Pes \text{ rebliment} + Pes \text{ aigua total}$$

On:

$$Pes \text{ buit} = Pes \text{ de la columna buida} (Kg)$$

$$Pes \text{ rebliment} = Pes \text{ del rebliment de la columna} (Kg)$$

$$Pes \text{ aigua total} = Pes \text{ de l'aigua} (Kg)$$

Per a l'aplicació d'aquestes equacions, prèviament s'ha de determinar el pes del rebliment, el pes del líquid de procés i el pes de l'aigua total mitjançant l'Equació 69, 70 i 71. Pel que fa al pes del líquid, es considera tant el fluid retingut en el rebliment com l'acumulat al fons de la columna. Atès que aquest fluid no és aigua pura sinó una mescla que constitueix el producte final, la densitat utilitzada per a aquest càlcul correspon al valor bibliogràfic segons la concentració de formalina del corrent de sortida.

$$Pes \text{ rebliment} = V \text{ llit} * \rho \text{ rebliment}$$

On:

$$V \text{ llit} = \text{Volum del llit fix} (m^3)$$

$$\rho_{\text{rebliment}} = \text{densitat del Mellapak 250Y} \left(\frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} \right)$$

$$\text{Pes líquid} = \text{Pes liq. retingut} + \text{Pes liq. fons}$$

On:

$$\text{Pes liq. retingut} = \text{Pes del líquid que es queda atrapat al rebliment (Kg)}$$

$$\text{Pes liq. fons} = \text{Pes del líquid del fons (Kg)}$$

$$\text{Pes aigua total} = \text{Pes aigua buit} + \text{Pes aigua llit}$$

On:

$$\text{Pes aigua buit} = \text{Pes aigua on no hi ha rebliment (Kg)}$$

$$\text{Pes aigua llit} = \text{Pes de l'aigua en el rebkiment (Kg)}$$

Un cop plantejades totes les equacions, es pot començar amb els càlculs:

$$\text{Pes rebliment} = \frac{\pi * 2,321^2}{4} * 4,5 * 170 = 3236,69 \text{ Kg}$$

$$\text{Pes líquid} = \frac{\pi * 2,321^2}{4} * 4,5 * 0,06 * 1115 + 1,85 * 1115 = 2611,54 \text{ Kg}$$

$$\text{Pes aigua total} = \left(30,36 - \frac{\pi * 2,321^2}{4} * 4,5 \right) * 1000 + \frac{\pi * 2,321^2}{4} * 4,5 * 980 = 19359,65 \text{ Kg}$$

$$\text{Pes columna operació} = 5407,3 + 3236,69 + 2611,54 = 11255,53 \text{ Kg}$$

$$\text{Pes columna plena d'aigua} = 5407,3 + 3236,69 + 19359,65 = 28003,64 \text{ Kg}$$

11.6. Calderes

Per a la simulació de les calderes en Hysys, se segueix un procediment senzill i sistemàtic. En primer lloc, s'afegeix un escalfador (*heater*), tal com es mostra a la figura 11.6.1.

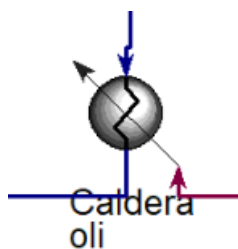


Figura 11.6.1. Representació d'un escalfador a Hysys

El segon pas consisteix a configurar els corrents d'entrada, de sortida i d'energia, així com el paquet de fluids seleccionat. En aquesta etapa s'utilitza el paquet anomenat «Aceites térmicos», el qual empra el paquet de propietats de Peng-Robinson. Aquest model termodinàmic es considera més adequat per a olis tèrmics que el model NRTL que s'aplica a la resta de la planta.

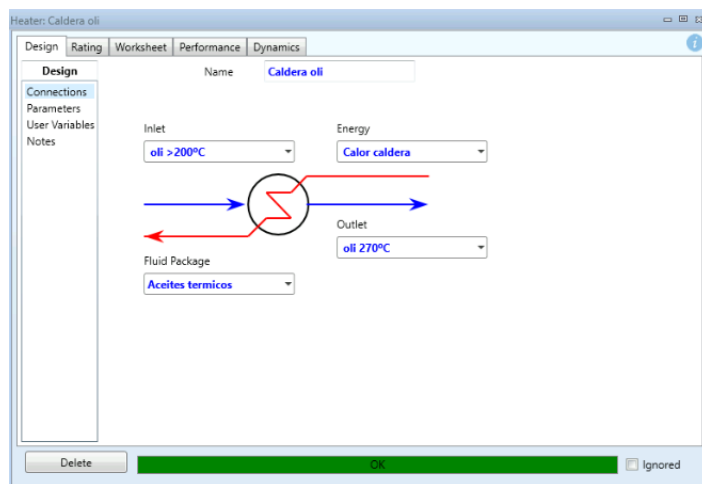


Figura 11.6.2. Apartat de connexions dins la pestanya de disseny del heater

Finalment, s'introdueixen les variables operatives de temperatura, pressió i cabal dels corrents. Si es disposa dels valors finals (generalment la temperatura de sortida), aquests s'especifiquen directament a la pestanya de condicions del full de treball (*Worksheet*). En canvi, si es coneix la diferència entre l'entrada i la sortida (com ara la caiguda de pressió), aquesta variable es defineix en la secció de paràmetres de disseny (*Design -> Parameters*).

Heater: Caldera oli				
Design Rating Worksheet Performance Dynamics				
Worksheet	Name	oli >200°C	oli 270°C	Calor caldera
Conditions	Vapour	0,0000	1,0000	<empty>
Properties	Temperature [C]	200,4	270,0	<empty>
Composition	Pressure [bar]	1,400	1,200	<empty>
PF Specs	Molar Flow [kgmole/h]	108,4	108,4	<empty>
	Mass Flow [kg/h]	1,800e+004	1,800e+004	<empty>
	Std Ideal Liq Vol Flow [barrel/day]	2554	2554	<empty>
	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	2,513e+004	9,417e+004	<empty>
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-410,1	-279,5	<empty>
	Heat Flow [kW]	757,0	2836	2080

Figura 11.6.3. Condicions del full de càlcul

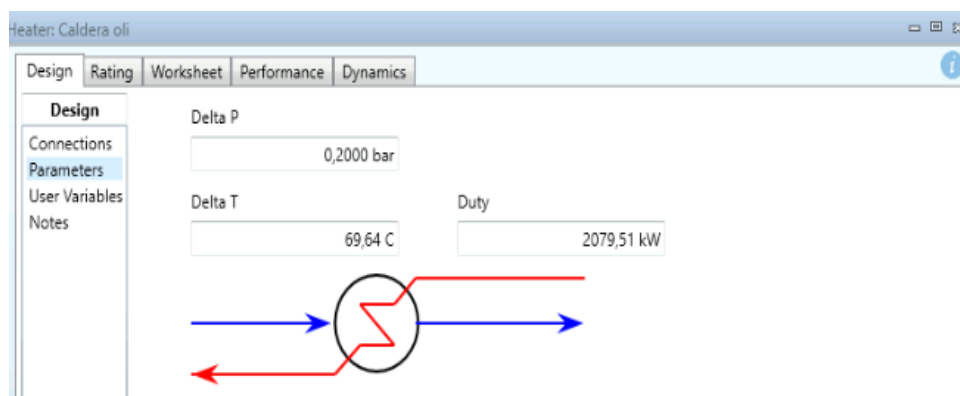


Figura 11.6.4. Pestanya de paràmetres de disseny

11.7 Bescanviadors de calor

Els bescanviadors de calor presenten una complexitat superior a la de les calderes, i els seus càlculs depenen directament del tipus d'equip utilitzat. En aquesta planta, s'utilitzen exclusivament bescanviadors de calor de carcassa i tubs a causa de la seva versatilitat, accessibilitat i resistència a altes temperatures, malgrat que són més voluminosos que els de plaques. Per al dimensionament d'aquests equips, s'opta per realitzar una simulació mitjançant el programari Aspen Hysys, atesa la seva rapidesa en comparació amb el mètode analític de Kern. Durant el procés de simulació, se segueixen els passos següents:

11.7.1. Preparació prèvia

Abans d'executar la simulació a Hysys, s'han de configurar els components i les propietats a la pestanya corresponent (*Properties*). Dins d'aquest entorn, primer es creen les llistes de components necessaris. Es prem el botó «Add», mostrat a la *Figura 11.7.1*, i s'afegeixen les substàncies requerides. En el cas de la planta de Formachem, es disposa d'una llista específica per els olis tèrmics i d'una altra per a la resta de components. Si un component no es troba disponible a la base de dades, cal definir un component hipotètic (*hypothetical component*), per al qual s'ha d'introduir el punt d'ebullició normal, el pes molecular, la densitat del líquid, la temperatura crítica, la pressió crítica, el volum crític i el factor acèntric.

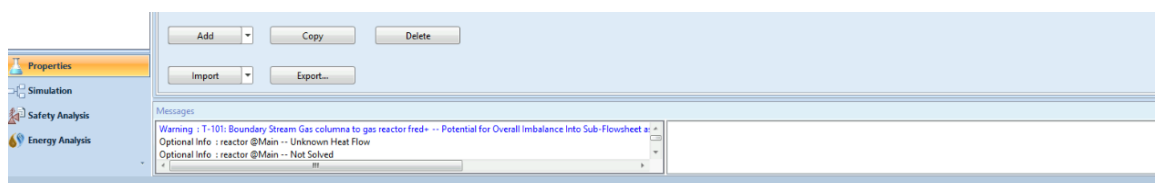


Figura 11.7.1. Botó per afegir noves llistes de components

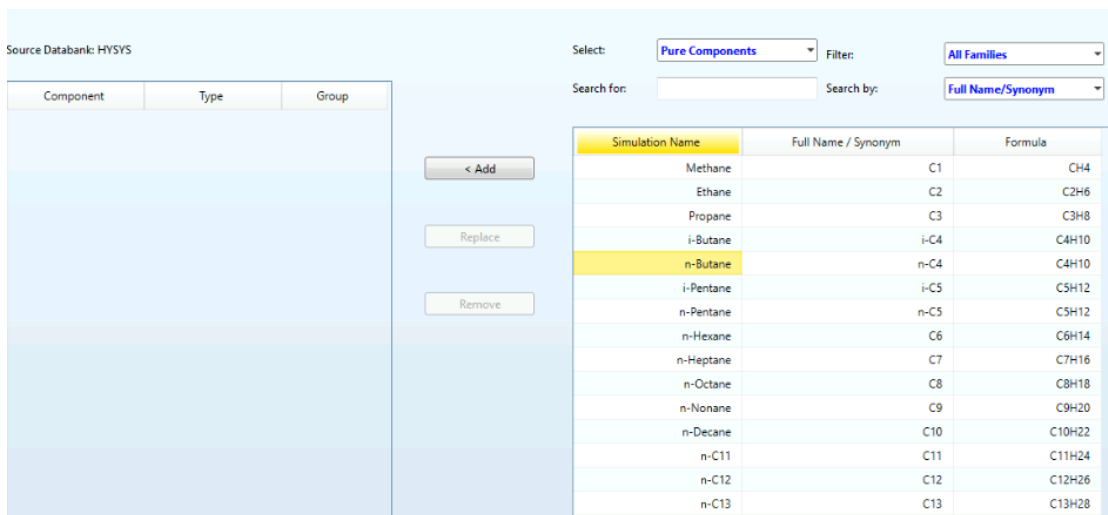


Figura 11.7.2. Creació d'una nova llista de components

A continuació, s'especifiquen les llistes de components amb l'objectiu d'evitar errors previs a l'assignació del paquet de fluids (*fluid package*). Per a la creació d'aquest paquet de fluids, es selecciona la secció corresponent dins de l'arbre de navegació i es prem el botó «Add».

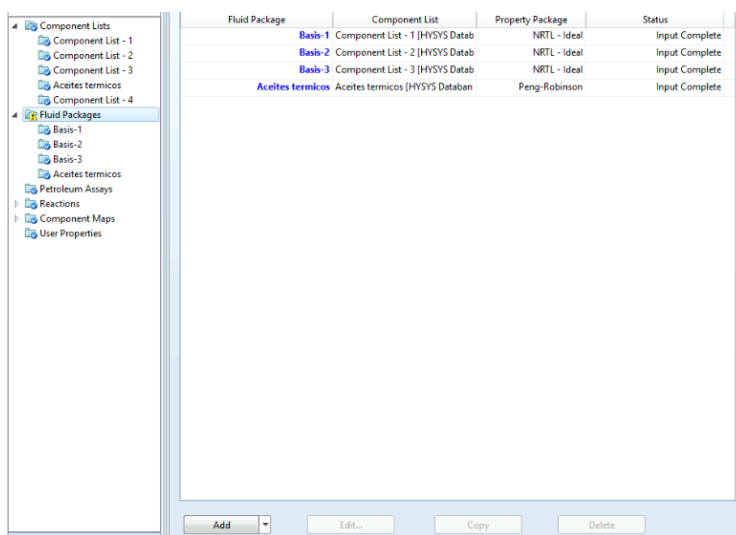


Figura 11.7.3. Llista de paquets de fluids

Al nou paquet de fluids se li assigna la llista de components corresponent i es selecciona el paquet de propietats que estimi amb major precisió el comportament termodinàmic de les substàncies implicades.



Figura 11.7.4. Selecció de la llista de components per assignar



Figura 11.7.5. Paquets de propietats

La separació dels olis tèrmics respecte a la resta de components permet assignar-los a paquets de fluids diferents, cadascun amb el seu propi paquet de propietats, els quals poden coincidir o no. En aquest cas concret, aquesta distinció és necessària atès que el paquet de propietats més adequat per als olis tèrmics (Peng-Robinson) difereix de l'utilitzat per a la resta de components (NRTL). Un cop definits aquests paràmetres, ja és possible accedir a l'entorn de simulació per iniciar el modelatge del procés.

11.7.2. Simulació prèvia

Per facilitar els càlculs posteriors, resulta d'utilitat simular prèviament el sistema mitjançant un escalfador (*heater*) i un refrigerador (*). En prémer la tecla F4, es desplega la paleta de models (*Model Palette*); des d'aquesta pestanya, s'arrossegueuen els equips cap a l'entorn de simulació, ensems amb els corrents de matèria (identificats en color verd).*

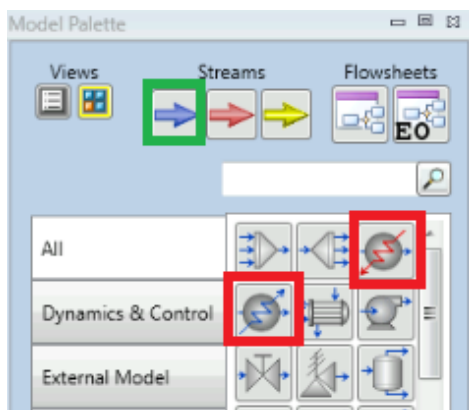


Figura 11.7.6. Paleta de models

En aplicar el mateix procediment descrit per a la caldera als corrents de servei i de procés, s'obté una configuració anàloga a la que es mostra a la *Figura 11.7.8*.

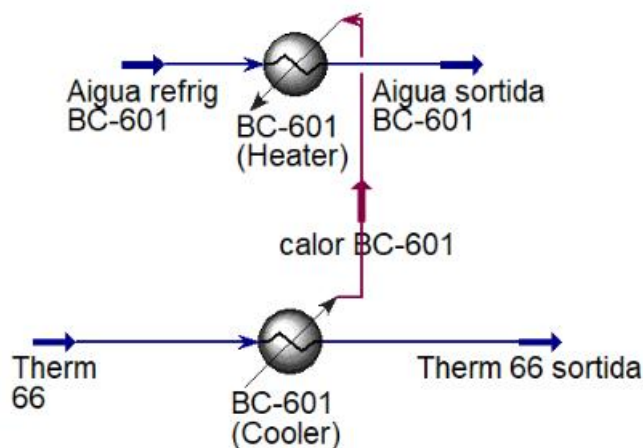


Figura 11.7.7. Representació al Hysys del heater i del cooler

En el cas del bescanviador BC-601, aquesta simulació prèvia proporciona una aproximació de la calor que ha d'extreure el fluid de procés i permet estimar, mitjançant iteracions, un cabal d'aigua adequat per iniciar la simulació definitiva.

11.7.3. Simulació

Un cop finalitzada la preparació prèvia, s'accedeix novament a la paleta de models i s'insereix un bescanviador de calor. Prenent com a referència l'equip BC-601, des de la pestanya de disseny del bescanviador es determina que l'oli circuli pels tubs, atès que és el fluid calent. Es tracta d'una decisió de caràcter arbitrari, ja que existeixen altres criteris de disseny amb un pes equivalent que en justifiquen la disposició a la carcassa. En aquest punt, resulta imprescindible seleccionar el paquet de fluids adequat per a cada corrent.

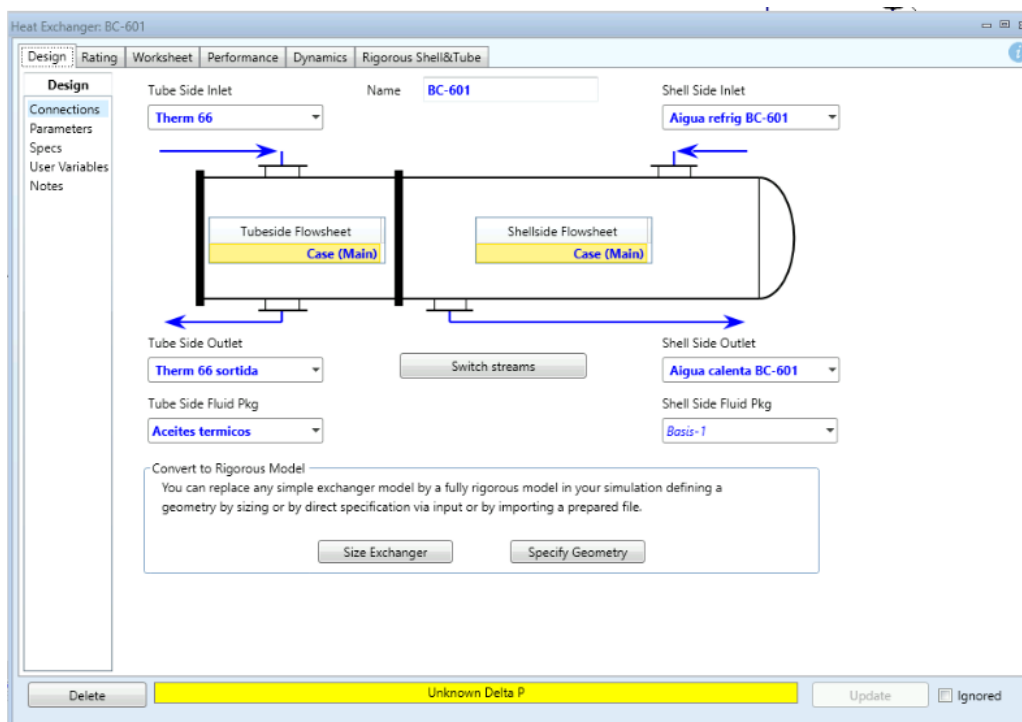


Figura 11.7.8. Pestanya de disseny del bescanviador

A continuació, des de la secció de paràmetres (*Design -> Parameters*), es selecciona el model de càlcul del bescanviador. El model predeterminat pel programari és el denominat «Simple End Point»; no obstant això, aquest mètode resulta excessivament simplificat per garantir una simulació acceptable, de manera que cal seleccionar el model «Rigorous Shell & Tube».

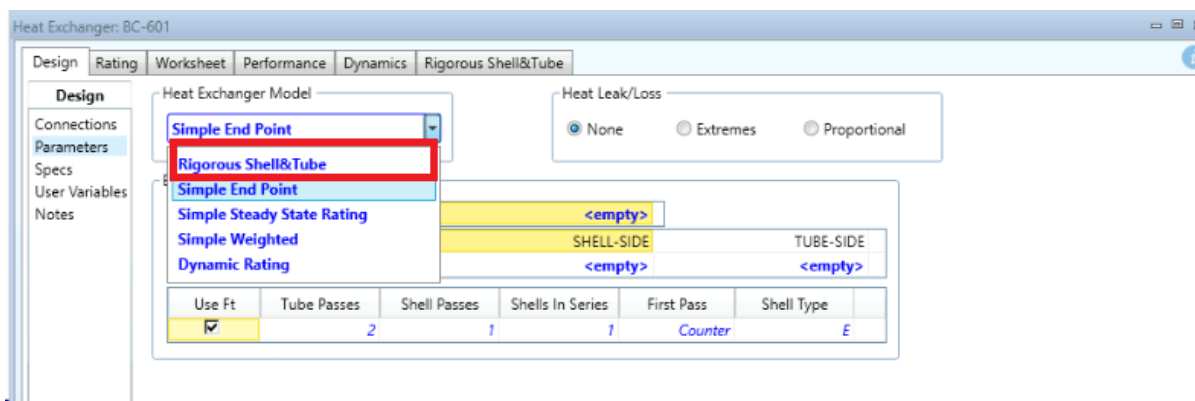


Figura 11.7.9. Indicació per canviar el model a Rigorous Shell&Tube

La selecció d'aquest model habilita una pestanya homònima des de la qual s'accedeix a l'entorn de disseny i simulació Aspen EDR (*Exchanger Design & Rating*).

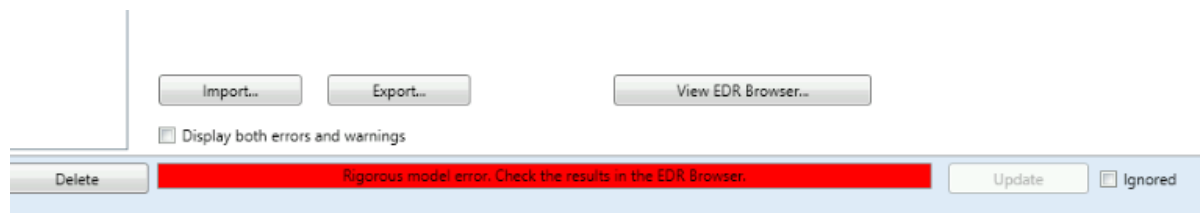


Figura 11.7.10. Botó per obrir el buscador EDR

Com es pot veure a la següent figura, el bescanviador es troba encara molt incomplet.

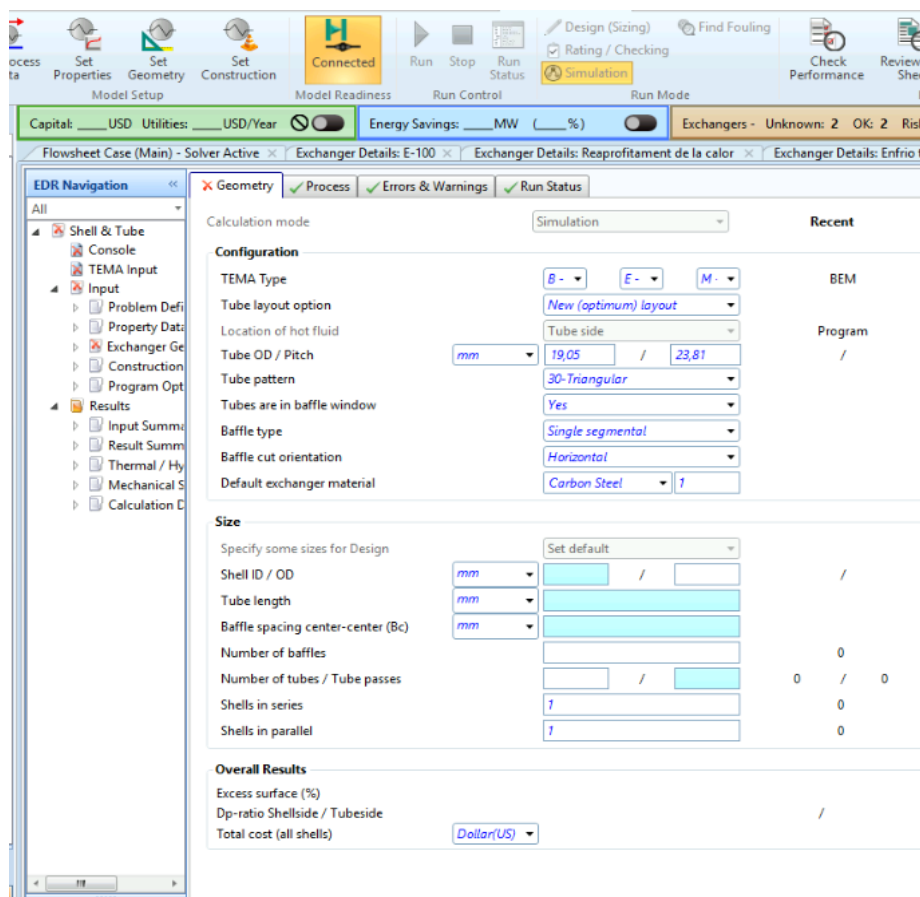


Figura 11.7.11. Pestanya del buscador EDR incompleta

En primer lloc, se selecciona el tipus de capçal; atès que no es requereix cap modificació, es manté la configuració predeterminada (tipus BEM). Posteriorment, es defineix la distribució (*pitch*) dels tubs, de manera que s'opta per un patró triangular que proporciona una major transferència de calor en comparació amb les configuracions quadrada, quadrada rotada o triangular rotada. Finalment, pel que fa al material de construcció, se selecciona l'acer inoxidable 316L a causa de la seva alta resistència a la corrosió. La resta de paràmetres els calcula directament Aspen Hysys, tot i que cal canviar el mode de càlcul a «Disseny» (*Design*). Per habilitar aquesta opció, cal desconnectar prèviament l'equip mitjançant el botó de connexió («Connected»).

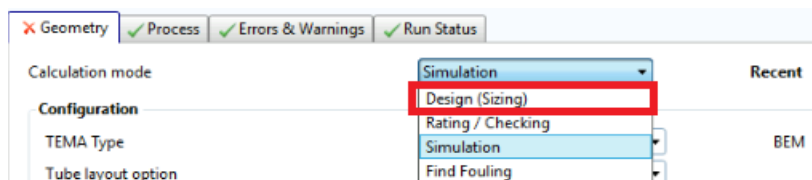
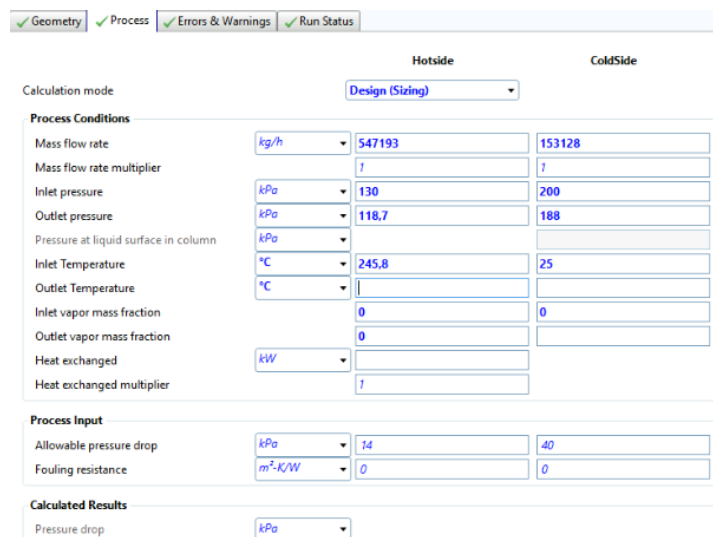


Figura 11.7.12. Canvi de mode de càlcul de simulació a disseny

A la secció de dades del procés (*Process Data*), s'introdueixen les variables conegudes; en aquest cas concret, s'especifica la temperatura de sortida del fluid de transferència tèrmica Therminol 66, la qual es fixa en 500 K.



	HotSide	ColdSide
Calculation mode	Design (Sizing)	
Process Conditions		
Mass flow rate	547193 kg/h	153128
Mass flow rate multiplier	1	1
Inlet pressure	130 kPa	200
Outlet pressure	118.7 kPa	188
Pressure at liquid surface in column		
Inlet Temperature	245.8 °C	25
Outlet Temperature		
Inlet vapor mass fraction	0	0
Outlet vapor mass fraction	0	
Heat exchanged		
Heat exchanged multiplier	1	
Process Input		
Allowable pressure drop	14 kPa	40
Fouling resistance	0 m²·K/W	0
Calculated Results		
Pressure drop	kPa	

Figura 11.7.13. Pestanya de procés del buscador EDR

Es prem el botó «Run», situat a la dreta del botó de connexió («Connected»), i s'espera fins que finalitzi el procés de càlcul. A continuació, es consulta novament la pestanya de geometria (*Geometry*).

Calculation mode: **Design (Sizing)** Recent

Configuration

TEMA Type: **B -** **E -** **M -** BEM

Tube layout option: New (optimum) layout

Location of hot fluid: Tube side

Tube OD / Pitch: **mm** 19,05 / 23,81 19,05 / 23,81

Tube pattern: 30-Triangular 30

Tubes are in baffle window: Yes Yes

Baffle type: Single segmental Single segmental

Baffle cut orientation: Horizontal H

Default exchanger material: SS 316L 9 SS 316L

Size

Specify some sizes for Design: No No

Shell ID / OD: **mm** 550 / 560 550 / 560

Tube length: **mm** 1650 1650

Baffle spacing center-center (Bc): **mm** 590 590

Number of baffles: 2

Number of tubes / Tube passes: 382 / 1 382 / 1

Shells in series: 1

Shells in parallel: 1

Figura 11.7.14. Pestanya de geometria del EDR amb la primera iteració

Si els resultats es consideren coherents, es restableix la connexió de l'equip i s'accedeix a la secció de resultats tèrmics i hidràulics (*Thermal/Hydraulic Results*). En aquest apartat, es verifica que la temperatura de sortida sigui la correcta, que la caiguda de pressió no provingui excessiva i que la velocitat dels fluids es mantingui dins dels intervals recomanats (entre 0,3 i 1 m/s per a líquids pel costat de la carcassa, i entre 1 i 2 m/s per a líquids pel costat dels tubs). Així mateix, es comprova l'absència de vibracions i que no se superi el límit establert per la normativa «TEMA RhoV2».

EDR Navigation << Overall Performance Resistance Distribution Shell by Shell Conditions Hot Stream Composition Cold Stream Composition

All

Shell & Tube Console TEMA Input Input Problem Defi Property Data Exchanger Ge Construction Program Opt Results Input Summ Result Summ Thermal / Hy Mechanical S Calculation D

Simulation		Shell Side		Tube Side	
Total mass flow rate	kg/h	153128	153128	547193	547193
Vapor mass flow rate (In/Out)	kg/h	0	0	0	0
Liquid mass flow rate	kg/h	153128	153128	547193	547193
Vapor mass fraction		0	0	0	0
Temperatures	°C	25	62,94	245,8	226,8
Bubble / Dew point	°C	120,24 / 120,24	119,14 / 119,14	/	/
Operating Pressures	kPa	200	193,01	130	117,772
Film coefficient	W/(m ² -K)	8489,6		1260,1	
Fouling resistance	m ² -K/W	0		0	
Velocity (highest)	m/s	0,81		2,47	
Pressure drop (allow./calc.)	kPa	40 / 6,99		14 / 12,228	
Total heat exchanged	kW	6814,2			
Overall clean coeff. (plain/finned)	W/(m ² -K)	984,4 /			
Overall dirty coeff. (plain/finned)	W/(m ² -K)	984,4 /			
Effective area (plain/finned)	m ²	36 /			
Effective MTD	°C	192,22			
Actual/Required area ratio (dirty/clean)		1 / 1			
Vibration problem (HTFS)		No			
TEMA RhoV2 limit exceeded		No			
		Unit	BEM	1 pass	1 ser 1 par
		Shell size	550	-	1650 mm
		Tubes	Plain		
		Insert	None		
		No.	382	OD	19,05 Tks 1,65 mm
		Pattern	30	Pitch	23,81 mm
		Baffles	Single segmental	Cut(°d)	38,75
		Total cost			38629 Dollar(US)

Heat Transfer Resistance

Shell side / Fouling / Wall / Fouling / Tube side

Shell Side Tube Side

Figura 11.7.15. Pestanya de resultats Tèrmics/Hidràulics del EDR

Si la velocitat de l'aigua es troba per sobre dels intervals recomanats, es repeteixen els passos anteriors modificant paràmetres de disseny com ara el diàmetre dels tubs. Aquest procediment es reitera fins que tots els paràmetres obtinguts se situen dins dels valors normatius o fins que la desviació és prou petita per considerar-se acceptable.

Finalment, a la *Taula 11.7.1* es recull el llistat dels cinc bescanviadors de calor amb els seus paràmetres de disseny més rellevants.

Taula 11.7.1. Taula resum dels bescanviadors de calor

Nom del equip	Fluid de procés	Fluid de servei	T ^a entrada (°C)	T ^a sortida (°C)
BC-201	Formaldehid	Aigua	134.8	78.53
BC-202	Formaldehid	Aigua	134.8	78.53
BC-203	Mescla de reactius	Dowtherm-A	134.74	250.3
BC-401	Formalina	Aigua	53.66	38.31
BC-601	Therminol 66	Aigua	245.85	227.36

11.8. Evaporadors

Des del punt de vista de la simulació en Aspen Hysys, els evaporadors es modelen de manera anàloga als bescanviadors de calor; per tant, es considera prescindible descriure detalladament el procediment de configuració de l'únic evaporador instal·lat (E-201). El metanol líquid provinent dels tancs de l'àrea 100 circula per l'interior dels tubs a 25 °C i s'obté en fase gasosa a 212,1 °C, mitjançant la integració tèrmica amb els productes de la reacció.

11.9 Torre de Refrigeració

La torre de refrigeració es considera un equip modular i estandarditzat, amb una gran comercialització dins del sector industrial. Els paràmetres operatius són els que regeixen la configuració d'aquest equip, com ho són el cabal a refrigerar, el salt tèrmic a dissipar o les condicions ambientals.

El procés d'elecció d'aquest equip no comporta càlculs complexos, sinó que requereix la definició de requisits de treball mentre que la part de disseny i elecció del model és responsabilitat del proveïdor de l'equip.

11.10 Canonades, bombes i compressors

11.10.1 Dimensionament de canonades

Per tal d'obtenir una circulació òptima de qualsevol fluid del sistema és necessari dimensionar amb consciència i màxim rendiment les canonades del procés. Si no es realitza correctament

aquest procediment es poden obtenir problemàtiques com cavitacions o pèrdues de càrrega que afectin l'eficiència de la planta.

Primerament, es comença per determinar el diàmetre nominal de la canonada. Aquest càlcul es realitza partint del càlcul d'un diàmetre preliminar a partir del valor del cabal volumètric de la secció, l'àrea de pas i la velocitat del fluid. El càlcul es realitza mitjançant l'Equació 72:

$$D = \sqrt{\frac{Q}{\frac{\pi}{4} * vt}}$$

On:

D = diàmetre preliminar (mm)

Q = cabal volumètric ($\frac{m^3}{h}$)

vt = velocitat típica ($\frac{m}{s}$)

Totes les canonades existents a la planta són seleccionades en distribució de secció circular per tal d'afavorir la facilitat de dimensionament.

A continuació, es passa a seleccionar les característiques de les canonades començant a partir del gruix d'aquestes. Per tal de trobar aquest valor, es selecciona un valor nominal a través de la normativa ASME B36.19M.

Coneixent el diàmetre nominal definit anteriorment, s'obté el diàmetre extern i el gruix de les canonades del sistema seguint la metodologia del model 40S.

Taula 11.10.1 Valors de diàmetres externs i gruixos de canonades en funció del DN

Diameter Nominal	Nominal Pipe Size	Outside Diameter	Wall Thickness	Weight
	inch	mm	mm	kg / meter
DN 6	1/8 inch	10.3	1.73	0.37
DN 8	1/4 inch	13.7	2.24	0.63
DN 10	3/8 inch	17.1	2.31	0.84
DN 15	1/2 inch	21.3	2.77	1.27
DN 20	3/4 inch	26.7	2.87	1.69
DN 25	1 inch	33.4	3.38	2.50
DN 32	1 1/4 inch	42.2	3.56	3.39
DN 40	1 1/2 inch	48.3	3.68	4.05
DN 50	2 inch	60.3	3.91	5.44
DN 65	2 1/2 inch	73	5.16	8.63
DN 80	3 inch	88.9	5.49	11.29
DN 90	3 1/2 inch	101.6	5.74	13.57
DN 100	4 inch	114.3	6.02	16.08
DN 125	5 inch	141.3	6.55	21.77
DN 150	6 inch	168.3	7.11	28.26
DN 200	8 inch	219.1	8.18	42.55
DN 250	10 inch	273.1	9.27	60.31
DN 300	12 inch	323.9	9.53	73.88
DN 350	14 inch	355.6	9.53	81.33
DN 400	16 inch	406.4	9.53	93.27

Per últim, es troba el diàmetre intern real de la canonada a partir de la *Taula 11.10.1* i es verifica que, utilitzant el diàmetre obtingut, es compleixen les velocitats típiques referents a les condicions i característiques del procés. El valor del diàmetre intern i la velocitat del fluid es calcula a partir de les *Equacions 73 i 74*, respectivament:

$$D_{int} = D_{ext} - e$$

On:

D_{int} = diàmetre intern (mm)

D_{ext} = diàmetre extern (mm)

e = espessor (mm)

$$v = \frac{Q}{\frac{\pi}{4} * (D_{int})^2}$$

On:

v = velocitat del fluid ($\frac{m}{s}$)

Q = cabal volumètric ($\frac{m^3}{s}$)

D_{int} = diàmetre intern (m)

11.10.2 Càlcul del gruix dels aïllants de les canonades

El gruix de l'aïllant tèrmic d'una canonada varia segons el seu diàmetre i el material utilitzat. Seguidament, es presenta l'exemple de càlcul per la canonada DN250-C1-206. Cada aïllant té diferents valors de conductivitat, fet que també influeix en el requeriment de gruix per tal d'arribar a l'aïllament necessari en cada cas. Un altre valor crític és la temperatura a aïllar, fet que depèn de l'àrea i el tram de la planta productiva.

Es determina el gruix de l'aïllant a partir de l'*Equació 75*:

$$d = \frac{D_{ext}}{2} * [e^{\frac{K}{K_{ref}} * \ln\left(\frac{D_{ext} + 2 * d_{ref}}{D_{ext}}\right)} - 1]$$

On:

d = gruix de l'aïllant (mm)

D_{ext} = diàmetre extern canonada (mm)

K = conductivitat tèrmica ($\frac{W}{m * K}$)

K_{ref} = conductivitat tèrmica de referència ($\frac{W}{m * K}$)

d_{ref} = gruix de referència (mm)

A l'hora de resoldre l'equació cal trobar valors del diàmetre extern, conductivitat tèrmica i diàmetre de referència de l'aïllant. Aquests valors es seleccionen a partir de la Taula 11.10.2. i 11.10.3.

Taula 11.10.2. Valors del gruix de referència de l'aïllant en funció del DN de la canonada i de la temperatura del fluid que hi circula

Tuberías		°C Temperatura del fluido <=										
Diámetro nominal		100	150	200	250	300	350	400	450	500	550	500
Di (")	Di (mm)	Espesor de aislamiento (mm)*										
1	34	40	50	60	80	100	120	120	140	160	200	200
1 1/2	48	50	60	80	80	100	120	140	160	180	200	220
2	60	50	60	80	100	100	120	140	160	190	210	220
2 1/2	73	60	80	100	100	110	130	140	170	190	210	230
3	89	60	80	100	110	110	130	150	180	200	220	240
4	114	80	80	110	110	120	140	160	180	210	240	250
6	168	80	80	110	120	130	150	170	190	230	260	280
8	219	80	100	120	130	130	160	180	200	240	270	290
10	273	100	100	120	130	140	170	190	210	250	290	310
12	324	100	100	120	130	140	170	200	220	260	300	320
14	356	120	120	130	140	140	180	200	230	260	300	320
16	407	120	120	130	140	150	180	200	230	270	310	330
18	457	120	120	130	140	150	180	210	240	280	320	340
20	508	120	120	130	140	150	190	210	240	280	320	350
22	559	120	130	140	150	150	190	220	250	290	330	350
24	609	130	140	140	150	150	190	220	250	290	330	360

Taula 11.10.3. Valors de la conductivitat tèrmica de l'aïllant en funció de la temperatura de disseny i del tipus d'aïllant

Producto	Lana de Vidrio	Lana de Roca	Lana ULTIMATE	Conductividad Térmica (λ)												Reac- ción al fuego	Formato	Rango Tª (°C)
				Tª	50	100	150	200	250	300	400	500	550	600	650			
AISLAMIENTO TÉRMICO Y CALORIFUGADO PARA TUBERÍAS																		
TECH PIPE Section MT 4.0	+			λ	0,037	0,043	0,052	0,062	0,074	0,089	-	-	-	-	-	A1	Coquilla	-40- 400
TECH PIPE Section MT 4.1		+		λ	0,038	0,045	0,054	0,063	0,073	0,084	-	-	-	-	-	A1	Coquilla	hasta 640
U-TECH PIPE Section MT 4.0			+	λ	0,037	0,043	0,052	0,062	0,074	0,089	-	-	-	-	-	A1	Coquilla	hasta 660
TECH Wired Mat MT 3.1		+		λ	0,040	0,047	0,057	0,067	-	0,094	0,134	0,173	0,200	-	-	A1	Manta	hasta 560
TECH Wired Mat MT 4.2		+		λ	0,041	0,047	-	0,065	-	0,090	0,124	0,167	0,217	-	-	A1	Manta	hasta 600
TECH Wired Mat MT 5.1		+		λ	0,039	0,045	0,052	0,061	-	0,081	0,106	0,137	-	0,175	0,195	A1	Manta	hasta 660
TECH Wired Mat MT 6.1		+		λ	0,040	0,045	0,051	0,058	-	0,076	0,098	0,124	-	0,156	0,174	A1	Manta	hasta 680

A continuació, es presenten els valors seleccionats per la canonada mencionada mitjançant la *Taula 11.10.4*:

Taula 11.10.4. Valors de la canonada de referència

PARÀMETRE	VALOR
Diàmetre extern	273
Conductivitat tèrmica	0,051 W/(m*K)
Conductivitat tèrmica referència	0,038 W/(m*K)
Gruix de referència de l'aïllant	130 mm
Producte	Tech PIPE Section MT 4.1

A partir d'aquests valors es realitza el càlcul del gruix de l'aïllant, tal com s'aprecia a continuació:

$$d = \frac{273}{2} * \left[\exp \left(\frac{0,051}{0,038} * \ln \frac{273 + 2 * 130}{273} \right) - 1 \right] = 198,54 \text{ mm}$$

En el cas de les canonades aïllades a partir de Poliisocianurat, es segueix la mateixa fórmula, però en aquest cas seguint el reglament RITE. Per tal de realitzar el càlcul, RITE determina que la conductivitat tèrmica de referència és 0,040 W/(m*K) i la conductivitat tèrmica s'obté a partir de la *Taula 11.10.5*.

Taula 11.10.5. Valors de la conductivitat tèrmica de l'aïllant en funció del diàmetre de la canonada

	CLASE según EN 14308	NORMA ENSAYO	UNIDADES	VALORES ESPECIFICADOS
Coeficiente conductividad térmica	λ_i 7d 10°C	UNE-EN 12667	W/m·K	0,022
Coeficiente conductividad térmica declarado	λ_D 10°C	UNE-EN 12667	W/m·K	$d_d < 80\text{mm}$ 0,028 $80 \leq d_d \leq 120\text{mm}$ 0,027 $d_d \geq 120\text{mm}$ 0,026
Reacción al fuego del producto	-	UNE-EN 13501-1	-	B _L -s2, d0
Estabilidad dimensional 48h. 70°C 90%HR	DS(TH)3	UNE-EN1604	%	$\Delta_{\text{long}}, \Delta_{\text{anch.}} \leq 2$ $\Delta_{\text{esp.}} \leq 6$
Estabilidad dimensional 48h -20°C				$\Delta_{\text{long}}, \Delta_{\text{anch.}} \leq 0,5$ $\Delta_{\text{esp.}} \leq 2$

11.10.3 Dimensionament de bombes

Per tal de dimensionar una bomba cal conèixer les necessitats energètiques d'aquesta. Aquests requeriments depenen de les condicions de treball, les espècies involucrades i l'àrea en la qual es troba.

Primerament, en el tram d'impulsió de la bomba cal seleccionar el cabal volumètric coneixen la composició i densitat de la mescla sabent la diferència de pressions que es vol adquirir en el pas per l'equip.

Les canonades són imprescindibles a l'hora d'obtenir els valors necessaris per dimensionar les bombes. Les característiques crítiques de les canonades que s'han de determinar abans dels càlculs són el diàmetre, gruix i material d'aquestes. A part, les característiques del tram aporten informació sobre l'alçada, llargada i presència d'altres accessoris com vàlvules, colzes o intercanviadors de calor.

També, s'han de determinar les pèrdues de càrrega que pateix el fluid a l'hora de travessar un accident, les quals es divideixen en pèrdues de tram recte i pèrdues per circulació per accidents. El càlcul de les mateixes depenen del factor de Fanning, el qual depèn de la rugositat relativa del material de la canonada i es determina a partir del diagrama de Moody corresponent a la *Figura 11.10.1*.

Prèviament, es calcula el valor del Reynolds a partir de l'Equació 76:

$$Re = \frac{\rho * v * D}{\mu}$$

On:

Re = nombre de Reynolds

ρ = densitat del fluid ($\frac{kg}{m^3}$)

v = velocitat del fluid ($\frac{m}{s}$)

D = diàmetre de la canonada (m)

μ = viscositat del sistema ($Pa * s$)

Tram d'aspiració:

$$Re = \frac{768 * 0,58 * 0,15}{0,42 * 10^{-3}} = 159085$$

Tram d'impulsió:

$$Re = \frac{768 * 1,7 * 0,09}{0,44 * 10^{-3}} = 267054$$

També, es calcula la rugositat relativa del tram a partir de l'Equació 77:

$$\text{Rugositat relativa} = \frac{\varepsilon}{D}$$

On:

ε = Rugositat del material (m)

D = diàmetre de la canonada (m)

Tram d'aspiració:

$$\text{Rugositat relativa} = \frac{1,5 \cdot 10^{-5}}{0,15} = 0,0001$$

Tram d'impulsió:

$$\text{Rugositat relativa} = \frac{1,5 \cdot 10^{-5}}{0,09} = 0,000166$$

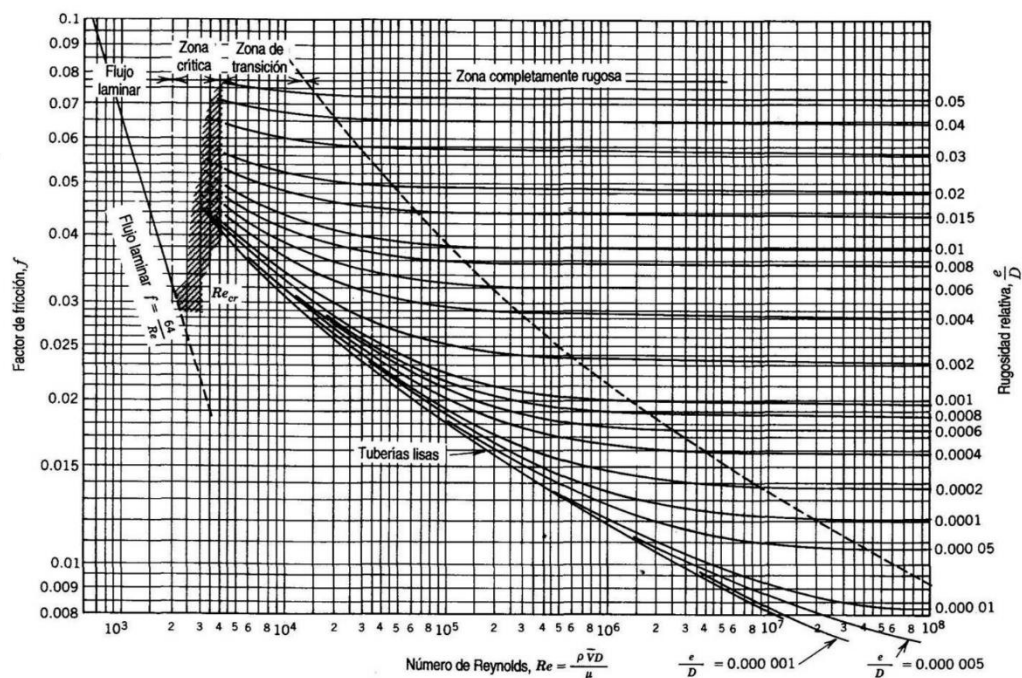


Figura 11.10.1. Diagrama de Moody

Una vegada analitzat el diagrama de Moody, es determina que el factor de Fanning correspon a un valor de 0,017 i 0,0165 pel tram d'aspiració i impuls respectivament.

Sabent el valor del factor de Fanning, es calcula les pèrdues del tram a partir de l'Equació 78:

$$Ev_{recte} = 4f * \frac{v^2}{2} * \frac{L}{D}$$

On:

$$Ev_{recte} = \text{Pèrdues de càrrega en tram recte} \left(\frac{J}{kg} \right)$$

f = factor de Fanning

v = velocitat del fluid $\left(\frac{m}{s} \right)$

L = llargada del tram (m)

D = diàmetre intern de la canonada (m)

Tram d'aspiració:

$$Ev_{rectea} = 4 * 0,017 * \frac{0,58^2}{2} * \frac{4}{0,15} = 0,3 J/kg$$

Tram d'impulsió:

$$Ev_{rectei} = 4 * 0,0165 * \frac{1,7^2}{2} * \frac{42,8}{0,09} = 45,35 J/kg$$

Per altra banda, a l'hora de calcular la resistència que suposa cada accident a la circulació cal donar-li un valor a partir d'un coeficient K el qual es determina a partir de la Taula 11.10.6.

Taula 11.10.6. Valors de K pels diferents accidents

ACCIDENT	K
Entrada/sortida circuit	
Entrada encanonada	0,78
Entrada cantells vius	0,50
Entrada arrodonida	0,04
Sortida encanonada	1,00
Sortida cantells vius	1,00
Sortida arrodonida	1,00
Colzes/ Unions	
Colze de 45° standard	0,35
Colze de 45° gran curvatura	0,20
Colze de 90° standard	0,75
Colze de 90° gran curvatura	0,45
Colze de 90° petita curvatura	1,3
Corba de 180°	1,5
T standard ús com a colze	1,0
T Standard amb bifurcació tancada	0,4
T standard amb divisió de cabal	1,0 (a)
Unió roscada	0,04
Maneguet d'unió	0,04
Vàlvula comporta	
oberta	0,17
¾ oberta	0,90
½ oberta	4,5
¼ oberta	24,0
Vàlvula de diafragma	
oberta	2,3
¾ oberta	2,6
½ oberta	4,3
¼ oberta	21,0

Sabent tots els accidents existents en el tram i obtenint el valor del seu coeficient es passa a calcular les pèrdues de càrrega corresponents a partir de l'Equació 79:

$$Ev_{acc} = 4f * \frac{v^2}{2} * K$$

On:

$$Ev_{acc} = \text{Pèrdues de càrrega per accidents} \left(\frac{J}{kg} \right)$$

$$v = \text{velocitat del fluid} \left(\frac{m}{s} \right)$$

$$K = \text{coeficient de pèrdues}$$

Tram d'aspiració:

$$Ev_{acca} = 4 * 0,017 * \frac{0,58^2}{2} * 0,88 = 0,01 J/kg$$

Tram impulsió:

$$Ev_{acci} = 4 * 0,0165 * \frac{1,7^2}{2} * 7,15 = 0,681 J/kg$$

A continuació, es realitza el càlcul de la càrrega total del sistema a partir de l'Equació 80:

$$h = (z_2 - z_1) * \frac{1}{9,81} * \left(\frac{P_2 - P_1}{\rho} + \frac{1}{2} * \left(\frac{v_2^2}{\alpha} - \frac{v_1^2}{\alpha} \right) + E_v \right)$$

On:

$$h = \text{càrrega del sistema} (m)$$

$$z = \text{alçada} (m)$$

$$P = \text{pressió} (bar)$$

$$\rho = \text{densitat} \left(\frac{kg}{m^3} \right)$$

$$v = \text{velocitat del fluid} \left(\frac{m}{s} \right)$$

$$\alpha = \text{coeficient adimensional (per sistemes turbulents } \alpha = 1)$$

$$Ev = \text{pèrdues de càrrega} (m)$$

Es dona valor a l'equació i es troba el següent resultat:

$$h = (7,5 - 1,5) * \frac{1}{9,81} * \left(\frac{1,4 - 1,013}{768} + \frac{1}{2} * (1,7^2 - 0,58^2) + 46,341 \right) = 29,12 \text{ m}$$

Per últim, sabent el valor de la càrrega del sistema i el caudal que passa per la bomba, es calcula la potència de l'equip a partir de l'Equació 81:

$$Pt = \rho * g * Q * h$$

On:

Pt = potència de l'equip (W)

g = gravetat ($\frac{m}{s^2}$)

Q = cabal volumètric ($\frac{m^3}{s}$)

h = càrrega del sistema (m)

Es calcula i es troba el següent resultat:

$$Pt = 768 * 9,81 * \frac{38,96}{3600} * 29,12 = 2374,31W = 2,374 \text{ kW}$$

11.10.4 Dimensionament de compressors

El factor a determinar a l'hora de dimensionar un compressor és la seva potència. Aquest paràmetre permet caracteritzar el corrent a partir de les condicions de treball operatives del tram.

Abans de presentar l'equació per al càlcul de la potència, és necessari obtenir el valor de les pèrdues de calor que és expressat pel factor politròpic. S'aproxima aquest valor i es selecciona un valor constant d'1,4 en tots els casos del procés.

A continuació, es passa a calcular la potència requerida per l'equip, la qual es representa a partir de l'Equació 82:

$$W = \frac{n}{n-1} * R * T_e * \left[\left(\frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{n-1}{n}} - 1 \right] * \frac{m}{PM}$$

On:

W = potència teòrica (kW)

R = constant dels gasos ($\frac{J}{K * kmol}$)

T_e = temperatura d'entrada (K)

P_1 = Pressió d'entrada (bar)

P_2 = Pressió de sortida (bar)

m = cabal màssic ($\frac{kg}{s}$)

PM = pes molecular ($\frac{kg}{kmol}$)

n = factor politròpic

Es calcula i es troba el següent valor:

$$W = \frac{1,4}{1,4 - 1} * 8,314 * 298 * \left[\left(\frac{2,2}{1,013} \right)^{\frac{1,4-1}{1,4}} - 1 \right] * \frac{53430,82}{28,96 * 3600} = 1102,36 \text{ kW}$$

Un cop s'obté el valor de la potència requerida es determina la potència real de l'equip fixant un rendiment del 75% a partir de l'Equació 83:

$$W_{real} = W * \mu$$

On:

W_{real} = Potència real (kW)

W = Potència teòrica (kW)

μ = rendiment de l'equip

Per últim, es calcula la potència real i es troba el següent resultat:

$$W_{real} = 1102,36 * 0,75 = 826,77 \text{ kW}$$

11.11 Serveis

En aquest darrer punt es mostren els càlculs realitzats per a alguns dels serveis necessaris de la planta.

11.11.1 Electricitat i transformador elèctric

Per conèixer les dimensions que ha de tenir el transformador elèctric, s'ha de saber prèviament quin és el consum elèctric de la planta. Pel que fa als equips, es coneix que és són 5666,7 kW, però hi ha altres aparells i serveis auxiliars que també consumeixen electricitat, com per

exemple la il·luminació, les alarmes, els ordinadors de les oficines i de control, la climatització, entre d'altres. És per això que es fa un sobredimensionament d'un 20% i, el valor total de consum elèctric queda de la següent manera:

$$\text{Consum elèctric total} = 5666,7 \text{ kW} \cdot 1,2 = 6800,04 \text{ kW}$$

Així doncs, sabent que el consum elèctric total és de 6800,04 kW es pot calcular la potència aparent, per posteriorment seleccionar el transformador més adient. El factor de potència escollit és de 0,8 i la potència és 6,8 MW. Mitjançant l'Equació 84 es realitza el càlcul següent:

$$S = \frac{P}{f}$$

On

S = potència aparent (MVA)

P = potència (MW)

f = factor de potència

El valor de potència aparent que s'obté és:

$$S = \frac{6,8}{0,85} = 8 \text{ MVA}$$

Com que s'instal·len dos transformadors, es divideix la potència total a la meitat per saber el que absorbeix cadascun:

$$S \text{ per transformador} = \frac{8}{2} = 4 \text{ MVA}$$

Per evitar sobreescalfaments i disminuir la vida útil dels transformadors, es treballa amb un marge de seguretat, evitant així que treballin al seu 100% sempre. Per tant, assumint un marge d'un 20%, el valor de potència aparent de cada transformador és de 4,8 MVA.

11.12. Cost equips

A continuació es mostra les taules *Taula 11.12.1* i *Taula 11.12.2* la qual recull els valors de tots els paràmetres emprats en el càlcul dels costos dels equips segons el mètode de les correlacions de Sinnott % Towler. L'explicació i definició del càlcul es troba al *Capítol 7. Valoració econòmica*.

Taula 11.12.1 Càlcul cost dels equips part 1

Equip	Tipus	Constant a	Constant b	Paràmetre S	Valor S	Exponent n	Ce (2007) (USD)	Ce (per AISI 316L)	Ce (2025) (USD)	Ce (2024) (€)
TE-101	Sostre cònic	5000	1400	Capacitat (m3)	260	0,7	73645,07	95738,60	146847,47	126288,82
TE-102	Sostre cònic	5000	1400	Capacitat (m3)	260	0,7	73645,07	95738,60	146847,47	126288,82
TE-103	Sostre cònic	5000	1400	Capacitat (m3)	260	0,7	73645,07	95738,60	146847,47	126288,82
TE-501	Sostre cònic	5000	1400	Capacitat (m3)	230	0,7	67999,56	88399,43	135590,38	116607,72
TE-502	Sostre cònic	5000	1400	Capacitat (m3)	230	0,7	67999,56	88399,43	135590,38	116607,72
TE-503	Sostre cònic	5000	1400	Capacitat (m3)	230	0,7	67999,56	88399,43	135590,38	116607,72
TE-504	Sostre cònic	5000	1400	Capacitat (m3)	230	0,7	67999,56	88399,43	135590,38	116607,72
TE-604	Recipient a P vertical AI 304	15000	68	Massa carcassa (kg)	1426	0,85	47621,99	61908,59	94957,73	81663,65
TE-603	-	-	-	-	-	-	-	-	-	8200,00
TE-602	Sostre cònic	5000	1400	Capacitat (m3)	35	0,7	21864,59	-	33536,73	28841,58
TE-601	Horitzontal AI 304	11000	63	Massa carcassa (kg)	2760	0,85	63980,16	83174,21	127575,74	109715,13
ME-201	Estàtic	500	1030	Cabal (L/s)	8716,7	0,4	39313,08	51107,00	78389,84	67415,26
ME-401	Hèlix	15000	990	Potència motor (kW)	0,25715	1,05	15237,87	19809,22	30384,14	26130,36
E-201	Carcassa i tubs, tubs en U	24000	46	Àrea (m2)	189,4	1,2	48866,45	63526,39	97439,17	83797,68
BC-201	Carcassa i tubs, tubs en U	24000	46	Àrea (m2)	40,3	1,2	27882,61	36247,39	55597,62	47813,95
BC-202	Carcassa i tubs, tubs en U	24000	46	Àrea (m2)	40,3	1,2	27882,61	36247,39	55597,62	47813,95
BC-203	Carcassa i tubs, tubs en U	24000	46	Àrea (m2)	283,3	1,2	64313,80	83607,94	128241,01	110287,27
BC-401	Carcassa i tubs, tubs en U	24000	46	Àrea (m2)	9	1,2	24642,46	32035,20	49136,80	42257,65
BC-601	Carcassa i tubs, tubs en U	24000	46	Àrea (m2)	41,2	1,2	27986,89	36382,96	55805,56	47992,78
R-301	Recipient a P vertical AI 304	15000	68	Massa carcassa (kg)	53575	0,85	726421,14	944347,48	1448475,76	1245689,16
R-302	Recipient a P vertical AI 304	15000	68	Massa carcassa (kg)	53575	0,85	726421,14	944347,48	1448475,76	1245689,16
CA-401 (recipient)	Recipient a P vertical AI 304	15000	68	Massa carcassa (kg)	5407,3	0,85	116284,34	151169,64	231869,70	199407,94
CA-401 (rebliment)	Estructurat	0	6900	Volum (m3)	18,7	1	129030,00	167739,00	257284,40	221264,59
TR-1001	Torre de refrigeració	150000	1300	Cabal (L/s)	57,5	0,9	199847,62	259801,90	306533,81	263619,08
CL-601	Caldera 15 a 40 bar	106000	8,7	Cabal vapor d'aigua (kg/h)	18000	1	262600,00	341380,00	402785,78	346395,77

Taula 11.12.1 Càlcul cost dels equips part 2

Equip	Tipus	Constant a	Constant b	Paràmetre S	Valor S	Exponent n	Ce (2007) (USD)	Ce (per AISI 316L)	Ce (2025) (USD)	Ce (2024) (€)
P-101A	Bomba centrífuga	6900	206	Cabal (L/s)	10,82	0,9	8656,60	11253,57	17261,16	14844,59
P-101B	Bomba centrífuga	6900	206	Cabal (L/s)	10,82	0,9	8656,60	11253,57	17261,16	14844,59
P-102A	Bomba centrífuga	6900	206	Cabal (L/s)	1412,9	0,9	147818,33	192163,84	294748,13	253483,40
P-102B	Bomba centrífuga	6900	206	Cabal (L/s)	1412,9	0,9	147818,33	192163,84	294748,13	253483,40
P-103A	Bomba centrífuga	6900	206	Cabal (L/s)	1412,9	0,9	147818,33	192163,84	294748,13	253483,40
P-103B	Bomba centrífuga	6900	206	Cabal (L/s)	1412,9	0,9	147818,33	192163,84	294748,13	253483,40
P-401A	Bomba centrífuga	6900	206	Cabal (L/s)	2,425	0,9	7357,20	9564,36	14670,18	12616,35
P-401B	Bomba centrífuga	6900	206	Cabal (L/s)	2,425	0,9	7357,20	9564,36	14670,18	12616,35
P-501A	Bomba centrífuga	6900	206	Cabal (L/s)	8,49	0,9	8312,16	10805,81	16574,36	14253,95
P-501B	Bomba centrífuga	6900	206	Cabal (L/s)	8,49	0,9	8312,16	10805,81	16574,36	14253,95
P-601A	Bomba centrífuga	6900	206	Cabal (L/s)	5,5	0,9	7855,42	10212,04	15663,62	13470,71
P-601B	Bomba centrífuga	6900	206	Cabal (L/s)	5,5	0,9	7855,42	10212,04	15663,62	13470,71
P-602A	Bomba centrífuga	6900	206	Cabal (L/s)	67,06	0,9	15971,61	20763,09	31847,22	27388,61
P-602B	Bomba centrífuga	6900	206	Cabal (L/s)	67,06	0,9	15971,61	20763,09	31847,22	27388,61
P-603A	Bomba centrífuga	6900	206	Cabal (L/s)	92,1	0,9	18969,82	24660,77	37825,62	32530,03
P-603B	Bomba centrífuga	6900	206	Cabal (L/s)	92,1	0,9	18969,82	24660,77	37825,62	32530,03
C-201A	Compressor centrífug	490000	16800	Potència motor (kW)	1107	0,6	1616672,92	2101674,79	3223628,02	2772320,10
C-201B	Compressor centrífug	490000	16800	Potència motor (kW)	1107	0,6	1616672,92	2101674,79	3223628,02	2772320,10
OI-601	Osmosi inversa	-	-	-	-	-	-	-	-	37368,43
TF-601	Transformador elèctric	-	-	-	-	-	-	-	-	250000,00

11.13 Bibliografia

- [1] Braz, C. G., Mendes, A., Rocha, J., Alvim, R., & Matos, H. A. (2019). Model of an industrial multitubular reactor for methanol to formaldehyde oxidation in the presence of catalyst deactivation. *Chemical Engineering Science*, 195, 347–355. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2018.09.033>
- [2] Sarup, B., Nielsen, P. E. N., Hansen, V. L., & Johansen, K. (1991). *Catalyst for preparing aldehyde* (European Patent Application No. EP 0 423 692 A1). European Patent Office.
- [3] Hassan, K. H., & Mitchell, P. C. H. (2010). Evaluation of different methods to prepare the $\text{Fe}_2\text{O}_3/\text{MoO}_3$ catalyst used for selective oxidation of methanol to formaldehyde. *Studies in Surface Science and Catalysis*, 175, 475–478. [https://doi.org/10.1016/S0167-2991\(10\)75088-6](https://doi.org/10.1016/S0167-2991(10)75088-6)
- [4] Eastman Chemical Company. (s. f.). *Fluidos de transferencia de calor Therminol® de Eastman: Guía de selección* [Guía técnica]. Eastman Chemical Company.
- [5] Franz, A. W., Kronemayer, H., Pfeiffer, D., Pilz, R. D., Reuss, G., Disteldorf, W., Gamer, A. O., & Hilt, A. (2016). Formaldehyde. En *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*. Wiley-VCH. https://doi.org/10.1002/14356007.a11_619.pub2
- [6] Holstein, W. L., & Machiels, C. J. (1996). Inhibition of methanol oxidation by water vapor: Effect on measured kinetics and relevance to the mechanism. *Journal of Catalysis*, 162(1), 118–124. <https://doi.org/10.1006/jcat.1996.0265>
- [7] Linstrom, P. J., & Mallard, W. G. (Eds.). (s. f.). *NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69*. National Institute of Standards and Technology. <https://doi.org/10.18434/T4D303>
- [8] Acerinox. (s. f.). *EN 1.4401 / AISI 316: ACX 250* [Ficha técnica]. Acerinox.
- [9] Chase, M. W., Jr. (1998). *NIST-JANAF thermochemical tables* (4th ed., Monograph No. 9, pp. 1–1951). American Chemical Society.
- [10] Ahmadi, S., & Sefidvash, F. (2018). Study of pressure drop in fixed bed reactor using a computational fluid dynamics (CFD) code. *ChemEngineering*, 2(2), 14. <https://doi.org/10.3390/chemengineering2020014>
- [11] Kadoya, K., Matsunaga, N., & Nagashima, A. (1985). Viscosity and thermal conductivity of dry air in the gaseous phase. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 14(4), 947–970. <https://doi.org/10.1063/1.555744>
- [12] Hickman, D. A., Degenstein, J. C., & Ribeiro, F. H. (2016). Fundamental principles of laboratory fixed bed reactor design. *Current Opinion in Chemical Engineering*, 13, 1–9. <https://doi.org/10.1016/j.coche.2016.07.002>
- [13] ASME. (2022). *ASME B36.10M-2022: Welded and seamless wrought steel pipe*. The American Society of Mechanical Engineers.

- [14] Kim, T. H., Ramachandra, B., Choi, J. S., Saidutta, M. B., Choo, K. Y., Song, S. D., & Rhee, Y. W. (2004). Selective oxidation of methanol to formaldehyde using modified iron-molybdate catalysts. *Catalysis Letters*, 98, 161–165. <https://doi.org/10.1007/s10562-004-7932-6>
- [15] Amarine. (2020). Process design [PDF]. <https://amarineblog.com/wp-content/uploads/2020/10/flare-sizing-mach-number-requirements.pdf>
- [16] American Society of Mechanical Engineers. (2023). *ASME boiler and pressure vessel code, Section VIII: Rules for construction of pressure vessels, Division 1*.
- [17] American Society of Mechanical Engineers. (2013). *ASME Boiler and Pressure Vessel Code, Section II: Materials, Part D: Properties (Metric)*. ASME.
- [18] Poliuretanos, S.A. (s.f.). *Coquillas T-PIR+* [Ficha técnica]. Distriplac. <https://www.distriplac.com/media/catalog/product/3/1/31071663102.pdf>