

UAB

Universitat Autònoma
de Barcelona



METAFORM

DE METANOL A FORMOL | INNOVACIÓN QUÍMICA

Planta de Producció de Formaldehid

Treball de Fi de Grau

Juny 2026

AUTORES

Arcadi Baró Orfila
Guillem Casals Sendra
Roc Rossello Fonollosa
Sandro Alcantara Márquez
Javier Jaenes Fernández
Àlex Cabrera Sánchez

TUTOR

Rafa Bosch Palacios



UAB

Universitat Autònoma
de Barcelona



METAFORM

DE METANOL A FORMOL | INNOVACIÓN QUÍMICA

Planta de Producció de Formaldehid

Treball de Fi de Grau

Juny 2026

CAPÍTOL 11.
MANUAL DE CÀLCULS



Taula de continguts

11.1. Introducció	1
11.2. Disseny dels tancs	1
11.2.1. Tancs d'emmagatzematge reactiu i producte.....	1
11.2.2. Tanc pulmó nitrogen	5
11.2.3. Selecció materials del tancs	6
11.3. Disseny cubetes de retenció	6
11.3.2. Especificacions constructives i impermeabilització	7
11.4. Disseny dels mesclador:	8
11.4.1. Mesclador Mix-201:.....	8
11.4.2. Mesclador Mix-401:.....	12
11.5. Disseny del reactor:	13
11.5.2. Refrigeració reactor	16
11.5.3. Aplicació del codi ASME al disseny del reactor:	19
11.6. Disseny de la columna d'absorció:.....	20
11.6.1. Simulació columna d'absorció:	20
11.6.2. Dimensionament de la columna d'absorció:.....	23
11.6.3. Aplicació del codi ASME al disseny de les columnes d'absorció:	31
11.7. Disseny dels bescanviadors de calor i evaporadors:	33
11.7.1. Dimensionament dels bescanviadors i evaporadors	33
11.8. Disseny del reactor catalític oxidatiu:	36
11.8.1. Dimensionament del reactor:	36
11.8.2. Aplicació del codi ASME al disseny de reactors:	37
11.8.3. Calor generat per el reactor:	38
11.9. Canonades i bombes	40
11.9.1. Dimensionament de canonades	40
11.9.2. Exemple càlcul de canonades	41
11.9.3. Càlcul de pressions per canonades.....	42
11.9.4. Dimensionament bombes	43
11.9.5. Exemple dimensionament bombes	47
11.10. Serveis	49
11.10.1. Consum de gas calderes	49
11.10.2. Càlcul consum d'aigua	51

11.10.3. Consum elèctric dels chillers.....	51
11.11. Consum elèctric i dimensionament del transformador	52
11.12. Referencies	53
11.13. Annex.....	55

11.1. Introducció

En aquest capítol es presenta els càlculs realitzats per al conjunt del projecte, és a dir, el dimensionament dels equips, serveis, canonades i, en definitiva, de tot allò necessari per al funcionament adequat de la planta.

11.2. Disseny dels tancs

En aquest apartat es porta a terme l'explicació del procés per el dimensionament dels tancs d'emmagatzematge de la planta. Els productes a emmagatzemar són el metanol, el reactiu principal de la planta, i el formol al 37%, que es el producte a comercialitzar. Ambdós seran emmagatzemats a pressió atmosfèrica.

11.2.1. Tancs d'emmagatzematge reactiu i producte

Tancs d'emmagatzematge de metanol

Per el conèixer la quantitat de metanol que s'ha d'emmagatzemar en la planta primer es determina els dies de reserva de metanol que s'emmagatzemarà en la planta. En el cas de METAFORM s'ha considerat que lo més adient es tenir una reserva de 6.5 dies, en cas de que sorgeixin problemes Logístics, la planta continuaria amb el seu funcionament.

Per calcular el volum total a emmagatzemar , primer es calcula la necessitat de metanol fresc diària a la planta:

$$5930.5 \frac{kg}{h} \text{ de metanol} \cdot \frac{24 h}{1 dia} = 142332 kg \text{ de } \frac{metanol}{dia}$$

Mitjançant la densitat del metanol, passem de necessitat massica a necessitat volumètrica:

$$142332 \frac{kg}{d} \cdot \frac{1 m^3}{790 kg} = 180.17 \frac{m^3}{dia}$$

A continuació el volum final a emmagatzemar:

$$180.17 \frac{m^3}{dia} \cdot 6.5 dies = 1171.1 m^3$$

Finalment, es decideix que cada tanc emmagatzema-hi 195.18 m³, els quals equivaldrien al 95% de capacitat del tanc, per tant el volum real dels sis tancs es de 207 m³.

EN la planta de METAFORM, s'han escollit tancs de sostre cònic amb sostre flotant intern per l'emmagatzematge del metanol. La relació entre l'altura i el diàmetre d'aquest tancs típicament utilitzada és de entre 0.8 i el 0.9 . En aquest cas es seleccionarà la darrera.

$$V_{Geomètric} = \frac{\pi \cdot D^2}{4} \cdot H$$

Equació 11.2.1

On:

- D: Diàmetre exterior (m)
- H: Alçada del cos cilíndric (m) en aquest cas $0.9 \cdot D$

En l'equació 11.2.1 al aïllar el diàmetre es troba la següent expressió:

$$D = \sqrt{\frac{V_{Geomètric} \cdot 4}{\pi \cdot 0.9}} = \sqrt{\frac{207 \text{ m}^3 \cdot 4}{\pi \cdot 0.9}} = 6.63 \text{ m}$$

Llavors les dimensions dels sis tancs serien

- D=6.63m
- H: $0.9 \cdot D = 0.9 \cdot 6.63 = 6\text{m}$.

Càlcul per al tanc de Metanol (TVA-200):

En ser un producte no corrosiu emmagatzemat en acer inoxidable, el marge de corrosió és nul ($CA = 0$), però es manté el gruix estructural de l'estàndard:

$$t_d = \frac{4.9 \cdot 6.63 \cdot (6 - 0.3) \cdot 0.79}{115} + 0 = 1.27 \text{ mm}$$

Seguint el mètode del "One-Foot Method" de la normativa API 650, es calcula el gruix mínim requerit per a la virola inferior (t_d), que és la que suporta la major pressió hidrostàtica:

$$t_d = \frac{4.9 \cdot D \cdot (H - 0.3) \cdot G}{S_d} + CA$$

Equació 11.2.2

On:

- t_d : Gruix de disseny de la virola (mm).
- D: Diàmetre nominal del tanc (6,63 m).
- H: Nivell màxim de líquid (6,00 m).
- G: Densitat relativa del producte (Metanol approx 0,79; Formaldehid approx 1,08).
- S_d : Tensió admissible del material (115 MPa per a AISI 316L).

- CA: Marge de corrosió (Corrosion Allowance) (mm).

Es selecciona el gruix mínim constructiu de la fitxa tècnica: 5,0 mm

Tancs d'emmagatzematge de formol

El primer pas per determinar els valors del dimensionament dels tancs, és determinar quants dies por testa el formaldehid emmagatzemat en planta. . En el cas de METAFORM s'ha considerat que lo més adient no tenir emmagatzemat més de 2.3 dies la solució de formaldehid, per evitar la seva polimerització a paraformaldehid.

Per calcular el volum total a emmagatzemar , primer es calcula la producció diària de formol de la planta.

$$12626.26 \frac{kg}{h} \text{ de producte} \cdot \frac{24 h}{1 dia} = 303030.24 kg \text{ de } \frac{\text{metanolproducte}}{dia}$$

Mitjançant la densitat de la solució, passem de necessitat massica a necessitat volumètrica:

$$303030.24 \frac{kg}{d} \cdot \frac{1 m^3}{885.5 kg} = 342.21 \frac{m^3}{dia}$$

A continuació el volum final a emmagatzemar:

$$342.21 \frac{m^3}{dia} \cdot 2.3 dies = 784 m^3$$

Finalment es decideix repartir aquest volum en quatre tancs diferents, es decideix que cada tanc emmagatzema-hi 196 m³, els quals equivaldrien al 95% de capacitat del tanc, per tant el volum real dels quatre tancs tancs es de 207 m³.

EN la planta de METAFORM, s'han escollit tancs de sostre cònic amb sostre flotant intern per l'emmagatzematge del metanol. La relació entre l'altura i el diàmetre d'aquest tancs típicament utilitzada és de entre 0.8 i el 0.9 . En aquest cas es seleccionarà la darrera.

$$V_{Geomètric} = \frac{\pi \cdot D^2}{4} \cdot H$$

Equació 11.2.1

On:

- D: Diàmetre exterior (m)
- H: Alçada del cos cilíndric (m) en aquest cas 0.9·D

En l'equació 11.2.1 al aïllar el diàmetre es troba la següent expressió:

$$D = \sqrt{\frac{V_{Geomètric} \cdot 4}{\pi \cdot 0.9}} = \sqrt{\frac{207 \text{ m}^3 \cdot 4}{\pi \cdot 0.9}} = 6.63 \text{ m}$$

Llavors les dimensions dels sis tancs serien

- D=6.63m
- H: 0.9·D=0.9·6.63=6m.

Càlcul per al tanc de Formaldehid (TVA-200-FORM):

S'aplica un marge de corrosió de 2,0 mm a causa de la naturalesa corrosiva del producte i els requeriments de la ITC MIE-APQ 6.

$$t_d = \frac{4.9 \cdot 6.63 \cdot (6 - 0.3) \cdot 1.08}{115} + 2 = 3.74 \text{ mm}$$

Atès que el gruix estructural base segons l'estàndard constructiu és de 5,0 mm el gruix final adoptat és:

$$t_{final} = 5.0 \text{ mm} + 2.0 \text{ mm} = 7.0 \text{ mm}$$

Seguint el mètode del "One-Foot Method" de la normativa API 650, es calcula el gruix mínim requerit per a la virola inferior (td), que és la que suporta la major pressió hidrostàtica:

$$t_d = \frac{4.9 \cdot D \cdot (H - 0.3) \cdot G}{S_d} + CA$$

Equació 11.2.2

On:

- td: Gruix de disseny de la virola (mm).
- D: Diàmetre nominal del tanc (6,63 m).
- H: Nivell màxim de líquid (6,00 m).
- G: Densitat relativa del producte (Metanol approx 0,79; Formaldehid approx 1,08).
- Sd: Tensió admissible del material (115 MPa per a AISI 316L).
- CA: Marge de corrosió (Corrosion Allowance) (mm).

Es selecciona el gruix mínim constructiu de la fitxa tècnica: 5,0 mm

11.2.2. Tanc pulmó nitrogen

El primer pas es trobar el cabal volumètric de l'alimentació de metanol i el cabal de producte final. En el cas de la planta METAFORM és 6.94 m³/h i 14.85 m³/h.

El càlcul del cabal de blanketing per els tancs d'emmagatzematge s'ha fet seguint la guia de la referencia [17].

Una vegada es saben aquests cabals es determina el cabal de N₂ per el buidat del tancs d'emmagatzematge, amb la següent relació [17]:

$$Q_{N_2} \left(\frac{Nm^3}{h} \right) = Q_{Líquid} \left(\frac{m^3}{h} \right) \cdot 1$$

Equació 11.2.3

On

- $Q_{N_2} \left(\frac{Nm^3}{h} \right)$: és el cabal de nitrogen .
- $Q_{Líquid} \left(\frac{m^3}{h} \right)$: és el cabal del líquid a buidar.

Al determinat el cabal de N₂ per el buidat del tancs, es suposa un escenari desfavorable per el dimensionament del pic de demanda de nitrogen, el buidatge simultani de dos tancs de producte i dos tancs de metanol.

Llavors el pic de demanda de cabal de nitrogen pel buidatge de tancs es calcula de la següent manera:

$$Q_{N_2} \left(\frac{Nm^3}{h} \right) = 2 \cdot 14.85 \frac{m^3}{h} + 2 \cdot 6.94 \frac{m^3}{h} = 43.59 \frac{Nm^3}{h}$$

A continuació es calcula la demanda base per compensació tèrmica de la següent manera:

$$Q_{Base N_2} \left(\frac{Nm^3}{h} \right) = N^{\circ} Total \ tancs \cdot 1.5 \frac{m^3}{h \cdot tanc}$$

Equació 11.2.4

$$Q_{Base N_2} \left(\frac{Nm^3}{h} \right) = 10 \ tancs \cdot 1.5 \frac{m^3}{h \cdot tanc} = 15 \frac{Nm^3}{h}$$

Finalment es calcula el pic del cabal de nitrogen, afegint un marge de seguretat d'un 20%.

$$Q_{Pic N_2} \left(\frac{Nm^3}{h} \right) = \left(43.59 \frac{Nm^3}{h} + 15 \frac{Nm^3}{h} \right) \cdot 1.2 = 70 \frac{Nm^3}{h}$$

Per tant el cabal pic de disseny del sistema s'arrodonirà a $80 \frac{Nm^3}{h}$. Un cop s'ha trobat el pic de demanda es passa al dimensionament del tanc pulmó. Per el dimensionament del tanc pulmó s'ha escollit un temps de residència de tres minuts. Ara es calcula el volum necessari:

$$V_{necessari} = 1.33 \frac{Nm^3}{min} \cdot 3 mins = 4.00 Nm^3$$

A continuació es calcula el volum del tanc:

$$V_{necessari} = \frac{V_{necessari} \cdot P_{atm}}{P_{emmagatzematge (bar abs)}} = \frac{4 \cdot 1.013}{9.013} = 0.449 m^3$$

Es selecciona un volum comercial de 500 litres.

11.2.3. Selecció materials del tancs

Taula 11.1. Materials utilitzats amb la seva justificació

Tancs de Formaldehid	Acer Inoxidable AISI 316L	Resistència a la corrosió (APQ 6)
Tancs de Metanol	Acer Inoxidable AISI 316L / 304L	Puresa del producte i durabilitat
Sostre flotant intern	Alumini / Escuma Poliuretà	Flotabilitat i eliminació de càmera de vapors
Tuberries de procés	Acer Inoxidable AISI 316L	Baix carboni per evitar corrosió intercrystal·lina
Juntes de brides	PTFE (Tefló)	Inèrcia química universal

11.3. Disseny cubetes de retenció

L'objectiu dels cubetes és garantir el confinament total en cas de fuga accidental, actuant com a barrera passiva segons les ITC MIE-APQ 1, 6 i 7. Es defineixen dos recintes independents per evitar la mescla de substàncies químicament incompatibles.

11.3.1. Càlcul de capacitats i verificació normativa

Segons l'Article 20 de la normativa APQ, el volum útil ha de ser igual al 100% del tanc més gran allotjat en el recinte. Per al càlcul, es considera el volum d'obstrucció que ocupen la resta de tancs fins a l'alçada de la paret (1,5m).

Dades de partida dels tancs (TVA-200):

- Diàmetre exterior (D): 6,63 m.
- Superfície d'ocupació (A_{base}): $\pi \cdot (6,63 : 2)^2 = 34,52 \text{ m}^2$

Volum d'obstrucció (V_{obs}): $34,52 \text{ m}^2 \cdot 1,5 \text{ m} = 51,78 \frac{\text{m}^3}{\text{tan c}}$ Verificació del Cubeta de Metanol (CB-100):

- Configuració: 6 tancs de 200 m³.
- Capacitat geomètrica: 30,0 m x 15,0 m x 1,5 m = 675 m³.
- Volum requerit (V_{req}): $V_{tan c max} + (5 \cdot V_{obs}) = 200 - 258,9 = 458,9 \text{ m}^3$
- Resultat: Compleix (675 > 458,9).

Verificació del Cubeta de Formaldehid (CB-601):

- Configuració: 4 tancs de 200 m³.
- Capacitat geomètrica: 20,0 m x 15,0 m x 1,5 m = 450 m³.
- Volum requerit (V_{req}): $V_{tan c max} + (3 \cdot V_{obs}) = 200 - 155,34 = 355,34 \text{ m}^3$
- Resultat: Compleix (450 > 355,34).

11.3.2. Especificacions constructives i impermeabilització

L'estanquitat absoluta és obligatòria per garantir que el vessament no s'hagi filtrat al subsòl en almenys 72 hores.

Taula 11.2.2. Especificacions constructives i impermeabilització

Paràmetre	Cubeto Metanol (CB-100)	Cubeto Formaldehid (CB-101)
Material Base	Formigó armat	Formigó armat
Impermeabilització	Pintura Epoxídica (resistent a alcohols)	Resina antiàcida epoxi-fenòlica (sense juntes)
Pendent de terra	1% cap a sumider	1% cap a sumider
Detecció de fuites	Sensors de líquid en punts baixos	Sensors de líquid en punts baixos
Drenatges	Vàlvula manual normalment tancada	Vàlvula manual normalment tancada

11.4. Disseny dels mesclador:

11.4.1. Mesclador Mix-201:

Dimensionament

Per el dimensionament d'un mesclador en fases gas, el primer és calcula el caudal màssic total a l'entrada del Mix-100:

$$m_{total} = m_{metanol} + m_{O_2} + m_{N_2} = 5047 + 31400 + 9538 = 26556 \frac{kg}{h}$$

Seguidament, és calculen els cabals molars:

$$n_{metanol} = \frac{5046 \frac{kg}{h}}{32 \frac{kg}{kmol}} = 157.5 \frac{kmol}{h}$$

$$n_{O_2} = \frac{9538 \frac{kg}{h}}{32 \frac{kg}{kmol}} = 298.1 \frac{kmol}{h}$$

$$n_{N_2} = \frac{31400 \frac{kg}{h}}{28 \frac{kg}{kmol}} = 1121.5 \frac{kmol}{h}$$

Ara que s'ha trobat el cabal molar de cada component, es procedeix amb el càlcul del cabal volumètric.

$$Q = \frac{n_{total} \left(\frac{kmol}{h} \right) \cdot R \left(\frac{kPa \cdot m^3}{kmol \cdot K} \right) \cdot T(K)}{P(kPa)}$$

Equació 11.4.1

On:

- Q: cabal volumètric del corrent (m³/h)
- n_{total} : cabal molar total del corrent (kmol/h)
- R: constant dels gasos ideals ($8.31 \frac{kPa \cdot m^3}{kmol \cdot K}$)
- T: Temperatura d'operació del mesclador. (K)
- P: Pressió d'operació del mesclador (kPa)

Tant la temperatura com la pressió d'operació del mixer s'han extret d'Aspen Hysys.

$$Q = \frac{1577.1 \left(\frac{\text{kmol}}{\text{h}} \right) \cdot 8.31 \left(\frac{\text{kPa} \cdot \text{m}^3}{\text{kmol} \cdot \text{K}} \right) \cdot (273 + 114.2)(\text{K})}{150(\text{kPa})} = 33810 \frac{\text{m}^3}{\text{h}} = 9.39 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}$$

A continuació, és calcula el diàmetre del mesclador, en aquest cas, es necessari suposar una velocitat típica de circulació dels gasos.

$$A(\text{m}^2) = \frac{Q \left(\frac{\text{m}^3}{\text{s}} \right)}{v \left(\frac{\text{m}}{\text{s}} \right)}$$

Equació 11.4.2

On:

- Q: cabal volumètric del corrent (m³/s)
- v: velocitat típica de circulació dels gasos m/s)
- A: àrea del mesclador (m²)

$$A = \frac{9.39 \frac{\text{m}^3}{\text{s}}}{15 \frac{\text{m}}{\text{s}}} = 0.61 \text{ m}^2$$

Un cop hem trobat el àrea del mesclador, i sabent que l'àrea d'un mesclador helicoidal és pot calcular de la mateixa manera que un cilindre, es troba que el diàmetre és el següent:

$$A = \frac{\pi}{4} \cdot D^2 \rightarrow D = \sqrt{\frac{4 \cdot A}{\pi}} = \sqrt{\frac{4 \cdot 0.61}{\pi}} = 0.88 \text{ m}$$

Al tenir un diàmetre de 880 mm, s'escull el diàmetre comercial DN 900

Un cop s'ha calculat el diàmetre del mixer, es passarà a calcular la seva longitud.

$$L_{total} = N_{elements} \cdot L_{element}$$

$$\text{On } L_{element} = 1.5 \cdot D$$

Equació 11.4.3 [12]

On:

- D: diàmetre del mixer (m)
- L_{total} : és la longitud del mixer (m)
- $L_{element}$: és la longitud per cada element helicoidal.
- $N_{elements}$: és el número d'elements helicoidals. Segons la documentació tècnica de StaMixCO [6], la configuració d'un mesclador estàtic helicoidal inclouen de 6 elements.

Per tant la longitud del mesclador seria la següent:

$$L_{total} = 4 \cdot 1.5 \cdot 0.59m = 5.28 m$$

A aquesta longitud es sobredimensionarà a 5.5 m.

Caiguda de pressió

A continuació es calcula la caiguda de pressió del mesclador. El primer pas es trobar la densitat de la mescla, en aquest cas és segueix el següent procediment:

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

Equació 11.4.4

On:

- ρ : és la densitat del fluid (kg/m^3)
- m : és el cabal màssic (kg/h)
- Q : és el cabal volumètric (m^3/h)

Per tant la densitat de la mescla és la següent:

$$\rho \left(\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right) = \frac{26556 \left(\frac{\text{kg}}{\text{h}} \right)}{33810 \left(\frac{\text{m}^3}{\text{h}} \right)} = 0.785 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

Un cop trobada la densitat del fluid, es calcula el nombre de Reynolds:

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

On:

- ρ : és la densitat del fluid (kg/m^3)
- v : és la velocitat del gas (m/s)
- D : és el diàmetre del mesclador (m)
- μ : és la viscositat del gas ($\text{Pa}\cdot\text{s}$) extret d'Apen Hysys

$$Re = \frac{0.785 \left(\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right) \cdot 15 \left(\frac{\text{m}}{\text{s}} \right) \cdot 0.9 \text{ (m)}}{2 \cdot 10^{-5} \text{ (Pa} \cdot \text{s)}} = 5.3 \cdot 10^5 \text{ (règim turbulent)}$$

A continuació, es calcula la caiguda de pressió del mesclador Mix-201, amb la següent equació:

$$\Delta P = f \cdot \frac{1}{2} \cdot \rho \cdot v^2 \cdot \frac{L}{D}$$

Equació 11.4.5

On:

- ρ : és la densitat del fluid (kg/m^3)
- v : és la velocitat del gas (m/s)
- D : és el diàmetre del mesclador (m)
- L : és la longitud del mesclador (m)
- F : és el factor de fricció

El factor de fricció en mescladors helicoidals es pot calcular de manera experimental amb la següent correlació [14]:

$$f = \frac{16}{Re} + 0.194 = \frac{16}{5.3 \cdot 10^5} + 0.194 = 0.194$$

Equació 11.4.6[14]

$$\Delta P = 0.194 \cdot \frac{1}{2} \cdot 0.785 \left(\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \right) \cdot 15^2 \left(\frac{\text{m}^2}{\text{s}^2} \right) \cdot \frac{5.5 \text{ (m)}}{0.9 \text{ (m)}} = 105 \text{ Pa}$$

Per tant, la caiguda de pressió estimada a través del mesclador és de 105 Pa (0,00105 bar), un valor que considerem negligible.

11.4.2. Mesclador Mix-401:

Per dimensionar un mesclador en fase líquida, el primer pas trobar el caudal volumètric. Al treballar amb el simulador Aspen Hysys ja ens dona el cabal volumètric que passa per el mesclador.

Una vegada, s'ha trobat el cabal volumètric es selecciona una velocitat del fluid. Per a líquids de baixa viscositat en un mesclador helicoidal, es recomana una velocitat d'1,0 a 1,5 m/s. Seleccionem 1,0 m/s per mantenir la pèrdua de càrrega baixa.

Una vegada, tenim el cabal i la velocitat, es calcula el diàmetre del mesclador amb l'equació 11.4.2.

$$A = \frac{14.3 \frac{m^3}{h} \cdot \frac{1 h}{3600 s}}{1 \frac{m}{s}} = 0.004 m^2$$

$$A = \frac{\pi}{4} \cdot D^2 \rightarrow D = \sqrt{\frac{4 \cdot A}{\pi}} = \sqrt{\frac{4 \cdot 0.004}{\pi}} = 0.07 m$$

Al tenir un diàmetre de 70 mm, s'escull el diàmetre comercial DN 80

Un cop s'ha calculat el diàmetre del mesclador, es passarà a calcular la seva longitud amb l'equació 11.4.3.

$$L_{total} = 4 \cdot 1.5 \cdot 0.07 m = 0.42 m$$

A aquesta longitud es sobredimensionarà a 0.5 m.

Caiguda de pressió

A continuació es calcula la caiguda de pressió del mesclador. El primer pas es trobar la densitat de la mescla aplicant l'equació 11.4.4:

Per tant la densitat de la mescla és la següent:

$$\rho \left(\frac{kg}{m^3} \right) = \frac{12626 \left(\frac{kg}{h} \right)}{14300 \left(\frac{m^3}{h} \right)} = 885 \frac{kg}{m^3}$$

Un cop trobada la densitat del fluid, es calcula el nombre de Reynolds:

$$Re = \frac{885 \left(\frac{kg}{m^3} \right) \cdot 1 \left(\frac{m}{s} \right) \cdot 0.8 (m)}{1 \cdot 10^{-3} (Pa \cdot s)} = 7.08 \cdot 10^5 \text{ (règim turbulent)}$$

A continuació, es calcula la caiguda de pressió del mesclador Mix-401, amb la l'equació 11.4.5.

$$\Delta P = 0.194 \cdot \frac{1}{2} \cdot 885 \left(\frac{kg}{m^3} \right) \cdot 1^2 \left(\frac{m^2}{s^2} \right) \cdot \frac{0.5 (m)}{0.8 (m)} = 54 Pa$$

Per tant, la caiguda de pressió estimada a través del mesclador és de 54 Pa (0,0005 bar) , un valor que considerem negligible.

11.5. Disseny del reactor:

El reactor és un reactor catalític multi tubular, per tant, el seu disseny es molt semblant al d'un bescanviador de carcassa i tubs, on el fluid calent, en aquest cas el calor generat per la reacció exotèrmica dels gasos, circula per els tubs, i el fluid de refrigeració circula per la carcassa.

Al ser un reactor catalític, els tubs s'han omplert de catalitzador, formant així un llit fix catalític. Al ser una reacció molt exotèrmica, s'ha optat per circular el fluid refrigerant en direcció contrària a la del gasos de la reacció.

- Model cinètic

Per a aquest projecte s'han escollit els paràmetres cinètics de l'article Deshmukh et al. 2005[1].

Aquest article ens indica que la reacció principal en la obtenció de formaldehid mitjançant el procés FORMOX és la següent:

$$r_{HCHO} = k_{HCHO} \theta_{CH_3OH} \theta_{O_2}$$

A més a més, l'article ens dona la cinètica de la reacció secundària que es dona durant aquest procés:

$$r_{CO} = k_{CO} \theta_{HCHO} \theta_{O_2}$$

On:

$$\begin{aligned} \bullet \quad \theta_{CH_3OH} &= \frac{K_{CH_3OH} P_{g,CH_3OH}}{1 + K_{CH_3OH} P_{g,CH_3OH} + K_{H_2O} P_{g,H_2O}} \\ \bullet \quad \theta_{O_2} &= \frac{K_{O_2} P_{g,O_2}^{1/2}}{1 + K_{O_2} P_{g,O_2}^{1/2}} \\ \bullet \quad \theta_{HCHO} &= \frac{P_{HCHO}}{1 + K_{CH_3OH} P_{g,CH_3OH} + K_{H_2O} P_{g,H_2O}} \end{aligned}$$

On:

- P_{g,CH_3OH} : Pressió parcial en el gas del metanol (atm)
- P_{HCHO} : Pressió parcial en el gas del formaldehid (atm)
- P_{g,H_2O} : Pressió parcial en el gas de l'aigua (atm)
- P_{O_2} : Pressió parcial en el gas de l'O₂ (atm)
- k_{HCHO} : constant cinètica de la reacció principal (mol/(kg·s))
- k_{CO} : constant cinètica de la reacció secundària (mol/(kg·atm·s))
- K_{CH_3OH} : constant d'adsorció del catalitzador per el metanol (1/atm)
- K_{H_2O} : constant d'adsorció del catalitzador per l'aigua (1/atm)
- K_{O_2} : constant d'adsorció del catalitzador per l'oxigen (1/atm)

Els paràmetres de les constants cinètiques, les quals depenen de la temperatura, s'extreuen de la següent taula [1].

Taula 11.5.1: Taula dels paràmetres cinètiques extret de Deshmukh et al 2005.

K_{CH_3OH} (atm ⁻¹)	2.6×10^{-4}	E_{CH_3OH}	(kJ mol ⁻¹)	-56.78
K_{O_2} (atm ^{-1/2})	1.423×10^{-5}	E_{O_2}	(kJ mol ⁻¹)	-60.32
K_{H_2O} (atm ⁻¹)	5.5×10^{-7}	E_{H_2O}	(kJ mol ⁻¹)	-86.45
K_{HCHO} (mol kg ⁻¹ s ⁻¹)	1.5×10^7	E_{HCHO}	(kJ mol ⁻¹)	86.00
K_{CO} (mol kg ⁻¹ atm ⁻¹ s ⁻¹)	3.5×10^2	E_{CO}	(kJ mol ⁻¹)	46.00

- Equació de disseny:

L'equació de disseny d'un reactor catalític multi tubular prové del balanç de matèria aplicat al sistema del nostre projecte. El seu disseny és molt semblant al d'un RCFP. Per tant, l'equació de disseny es troba de la següent manera:

Primer fem el balanç de matèria:

$$\text{Entrada} + \text{Generació} = \text{Sortida} + \text{Acumulació}$$

$$F_{A(W)} + r_A \cdot W = F_{A(W)+\Delta W} + \frac{dN_A}{dt}$$

Una vegada definit el balanç, s'ha de tenir en compte que es treballa de manera continua i en estat estacionari, per tant, el terme d'acumulació equival a zero.

$$F_{A(W)} - F_{A(W)+\Delta W} + r_A \cdot \Delta W = 0$$

A continuació, simplifiquem el balanç de matèria i es troba l'equació de disseny d'un reactor catalític.

$$\frac{dF_A}{dW} = -r_A$$

Equació 11.5.1

On:

- F_A : és el cabal molar del component determinat (mol/s)
- W : la massa de catalitzador del reactor (kg)
- r_A : és la velocitat de reacció del component determinat (mol/(kg·s))
- Caiguda de pressió:

En el disseny del reactor s'ha tingut en compte, les pèrdues de pressió de la corrent de gasos a l'hora de travessar el llit catalític. Per el càlcul de la pèrdua de pressió, s'ha utilitzat l'equació d'Ergun, la qual ens indica la pèrdua de pressió a través d'un llit empaquetat porós. Les característiques del catalitzador s'han extret de la referència [13].

$$\frac{dP}{dz} = \frac{-G}{\rho_{gas\text{ entrada}} \cdot Dp} \cdot \frac{1 - \theta}{\theta} \cdot \left(\frac{150 \cdot (1 - \theta) \cdot \mu}{Dp} + 1.75 \cdot G \right) \cdot \left(\frac{T}{T_E} \right) \cdot \left(\frac{P_E}{P} \right) \cdot \left(\frac{F_T}{F_{TE}} \right)$$

Equació 11.5.2

Ara es fa un canvi de variable per dimensionar el reactor respecte a la massa del catalitzador, es sap que la massa del catalitzador es pot calcular de la següent manera:

$$W = \rho_{llit} \cdot A_{llit} \cdot z$$

Equació 11.5.3

Si es convinent les equacions dona el següent:

$$\frac{dP}{dW} = - \frac{\beta_0}{\rho_{llit} \cdot A_{llit}} \cdot \left(\frac{T}{T_E} \right) \cdot \left(\frac{P_E}{P} \right) \cdot \left(\frac{F_T}{F_{TE}} \right)$$

Equació 11.5.4

On:

$$\beta_0 = \frac{-G}{\rho_{gas\ entrada} \cdot Dp} \cdot \frac{1 - \theta}{\theta} \cdot \left(\frac{150 \cdot (1 - \theta) \cdot \mu}{Dp} + 1.75 \cdot G \right)$$

- G = densitat de flux màssic (kg/m²·s)
- $\rho_{gas\ entrada}$ = densitat de la mescla de gases en l'entrada del reactor (kg/m³)
- ρ_{llit} = densitat del llit (kg/m³) [20]
- Dp = Diàmetre de la partícula (m) [20]
- θ = Porositat del llit
- μ = viscositat de la mescla de gases (kg/m*s)
- A = Àrea de la secció transversal del llit (m²)

Finalment per determinar les dimensions del reactor, s'ha realitzat el càlcul mitjançant la simulació en Matlab® utilitzant les equacions anteriors. El codi de utilitzat és mostra en el apartat d'annexos al final del capítol. A més a més, per la simulació s'ha tingut en compte que el catalitzador es mescla amb catalitzador inert per evitar punts calents dins del reactor. Aquesta informació ha estat extreta de l'article Braz et al. 2018 [2].

Gràcies a la simulació amb l'ordinador es troba que les diferents característiques del reactor:

- Nombre de tubs (De: 33.4mm): 4266 tubs
- Massa de catalitzador: 3990 kg
- Volum útil del reactor: 4.43 m³
- Caiguda de pressió al reactor: 0.47 atm
- Conversió metanol: 98%
- Els corrents de sortida es poden veure al Capítol 2. Equips en la fitxa d'especificació del reactor.

11.5.2. Refrigeració reactor

Per el dimensionament del sistema de refrigeració, s'ha utilitzat diferents equacions del mètode de Kern, donada la similitud d'aquest reactor amb un bescanviador de carcassa i tubs.

Per el disseny, s'ha determinat que tenim 4733 tubs de DN 1" (33.4mm de diàmetre exterior) i una longitud de 1.5m. Això ens proporciona una gran àrea de bescanvi de calor de 665 m².

El primer càlcul que es fa es el cabal de refrigerant necessari.

El primer pas per el càlcul del cabal de refrigerant, és el càlcul del calor de la reacció.

$$Q_{reacció} = -\Delta H_R \left(\frac{kJ}{mol} \right) \cdot F_A \left(\frac{mols}{s} \right) = -\Delta H_R \left(\frac{kJ}{mol} \right) \cdot F_{AE} \left(\frac{mols}{s} \right) \cdot x_A$$

Equació 11.5.5

On:

- $Q_{reacció}$: El calor que produeix la reacció (kJ/s)
- ΔH_R : l'entalpia de la reacció (kJ/mol) [7]
- F_{AE} : cabal molar del component clau en aquest cas el metanol (mol/s)
- x_A : conversió del component clau

$$Q_{reacció} = \left(-(-159) \left(\frac{kJ}{mol} \right) \right) \cdot 43.84 \left(\frac{mol}{s} \right) \cdot 0.98 = 6622.032 \frac{kJ}{s}$$

Una vegada es troba el calor de la reacció, es calcula el calor absorbit per el fluid refrigerant, en aquest cas es oli tèrmic Dowtherm A a 4 bars, per evitar que l'oli bulli dins de la carcassa del reactor.

$$Q_{reacció} = m_{DTM-A} \left(\frac{kg}{s} \right) \cdot Cp \left(\frac{kJ}{kg \cdot K} \right) \cdot (Ts - Te)(K)$$

Equació 11.5.6

On:

- m_{DTM-A} : cabal màssic d'oli tèrmic(kg/s)
- Cp : calor específica del Dowtherm A (kJ/kg·K)
- Ts : Temperatura de sortida del refrigerant (°C)
- Te : Temperatura d'entrada del refrigerant (°C)

$$6622 \frac{kJ}{s} = m_{DTM-A} \left(\frac{kg}{s} \right) \cdot 2.5 \left(\frac{kJ}{kg \cdot K} \right) \cdot (290 - 240)(K)$$

S'aïlla el cabal màssic de l'oli i trobem que per refredar el reactor es necessitant 53.36 kg/s de Dowtherm-A que serien 190000 kg/h .

Seguidament es dimensiona la carcassa del reactor a partir de la referencia [4], primer es calcula el diàmetre dels fas dels tubs:

$$D_b = D_e \cdot \left(\frac{Nt}{K1} \right)^{\frac{1}{n1}}$$

Equació 11.5.7

On:

- Nt : número de tubs.

- Db: diàmetre del feix de tubs en mm.
- De: diàmetre exterior dels tubs en mm.
- n1 i K1 són funció del pitch escollit i del número de passos per tubs.

Taula 11.5.2: Constants per l'equació 11.5.7 [4]

TABLE 19.4 Constants for use in Equation 19.3

No. passes	Triangular pitch, $p_t = 1.25d_o$				
	1	2	4	6	8
K ₁	0.319	0.249	0.175	0.0743	0.0365
n ₁	2.142	2.207	2.285	2.499	2.675

Pel disseny del bescanviador s'ha seleccionat un pas per carcassa i un passos per tub. Per tant:

$$D_b = 33.4 \cdot \left(\frac{4266}{0.319} \right)^{\frac{1}{2.142}} = 2819 \text{ mm}$$

Ara, seguint el mètode de Kern pel disseny de bescanviadors, es busca la diferència entre diàmetre de la carcassa i Db en mm. En la següent gràfica:

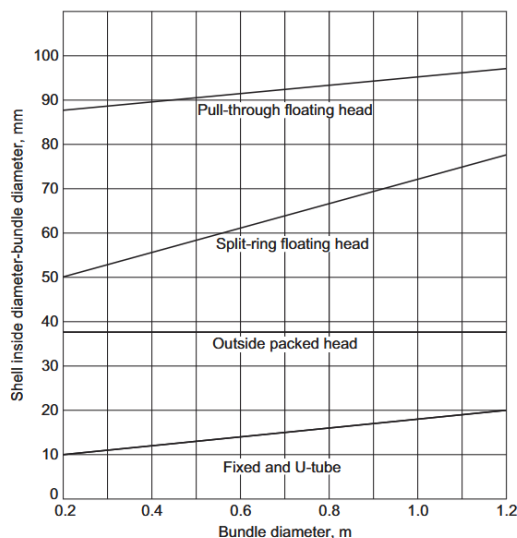


FIG. 19.12 Shell bundle clearance.

Figura 11.5.1: Gràfica pel càlcul del diàmetre de la carcassa. [4]

Ara, és passa el Db trobat de mil·límetres a metres, i seguint la geometria escollida de fixed and U-tube es busca la diferència Ds-Db. En aquest cas es troba que Ds-Db es 20mm

Per tant el nostre diàmetre de carcassa és 2839mm.

Els reactors catalítics per el procés FORMOX acostumen a ser d'una longitud de 1.5m i el diàmetre de la carcassa supera els 2.5 m de diàmetre [7]. Per tant, podem concloure que el disseny es correcte.

A continuació, es calcula el nombre de pantalles deflectores necessàries. Els deflectors son plaques que es col·loquen als costats de la carcassa que permeten

que circuli el més perpendicular possible al feix dels tubs, millorant la transferència de calor.

$$Nc = \left(\frac{L}{I_b} \right) - 1 = \left(\frac{1.5m}{0.4 \cdot 2.839} \right) - 1 = 0.28$$

Equació 11.5.8

- Ds: Diametre de la carcassa (m)
- Longitud dels tubs (m)
- Ib: L'espaiat entre pantalles (lb) que oscil·la entre 0.2 i 1 vegades el diàmetre de carcassa, essent el rang òptim entre 0.3 i 0.5 vegades el diàmetre de carcassa. [4]

Veient que el resultat de pantalles de deflectores necessàries és inferior a 1, no és necessari l'addició d'aquests al disseny del reactor.

11.5.3. Caiguda de pressió per carcassa

La caiguda de pressió de la carcassa s'ha mesurat com si fos un bescanviador de calor, per tant, observar l'apartat 11.7. *Disseny de bescanviadors de clor i evaporadors*.

11.5.4. Aplicació del codi ASME al disseny del reactor:

Una vegada s'ha dimensionat el reactor, es procedeix amb l'aplicació del codi ASME [per calderes i recipients a pressió, concretament la Secció VIII, Divisió 1] [10], per a determinar altres paràmetres de disseny d'aquestes, així com per exemple el gruix que han de presentar les seves parets.

- El material que s'ha decidit utilitzar per construir el reactor és el l'acer AISI316L. Com es treballa amb formaldehid, component el qual és corrosiu s'ha de tenir en compte que el material amb el qual es vol treballar pugui suportar aquest component. Així doncs, s'ha escollit aquest material que destaca per a la seva resistència contra components corrosius i el fet de ser més econòmics que altres aliatges.

A continuació, és calcula la pressió de disseny i la temperatura de disseny:

$$P_D = P_{operació} \cdot 1.1 = 2.2 = 32.33 \text{ psi}$$

Equació 11.5.9

Com la pressió de disseny es major a 30 psi, s'agafarà com la pressió de disseny la trobada anteriorment.

$$T_D = 300 + 50 = 350^{\circ}\text{C}$$

Equació 11.5.10

A continuació es calcula el gruix de la part cilíndrica del reactor amb la següent equació:

$$t = \frac{P_D \cdot R}{S \cdot E - 0.6 \cdot P_D} + C$$

Equació 11.5.11

On:

- t: és el gruix de la columna d'absorció (in)
- S: és la tensió màxima permissible (psi) [9]
- R: és el radi de la carcassa (inch) amb el sobre dimensionament
- E: és el factor de soldadura
- PD: és la pressió de disseny (psi)
- C: marge de corrosió (1.5 mm)

$$t = \frac{32.33 \cdot 575 \text{ inch}}{16700 \cdot 0.85 - 0.6 \cdot 32.33} + 0.059 = 1.37 \text{ inch} = 35 \text{ mm}$$

El gruix de la part cilíndrica serà de 35 mm.

11.6. Disseny de la columna d'absorció:

11.6.1. Simulació columna d'absorció:

Per al disseny de la columna d'absorció T-401 s'ha utilitzat el programa Aspen HYSYS, i així conèixer els principals paràmetres de disseny del sistema, com ara el nombre de plats teòrics, la càrrega hidràulica i les condicions d'operació òptimes. La simulació ha permès modelitzar el comportament del sistema gas-líquid sota les condicions de procés. A partir dels resultats obtinguts amb el simulador, s'han determinat les dimensions i especificacions tècniques de l'equip necessàries per al correcte funcionament de la columna dins el procés productiu de METAFORM S.L.

El primer pas per la simulació de la columna es definir els components presents en l'operativa i seleccionar el paquet termodinàmic adient. Per definir els components s'ha d'anar a la pestanya de *Properties*, concretament a l'apartat *Component List*. Allà es seleccionen els components de l'operativa: monòxid de carboni (CO), metanol (CH₃OH), nitrogen (N₂), oxigen (O₂), formaldehid (CH₂O) i aigua (H₂O). Un

cop definits els components en la mateixa pestanya de *Properties* es selecciona l'aparat *Fluid Package*, en aquest cas s'ha escollit el paquet NRTL-Ideal, ja que permet simular mescles amb components polars i no ideals com és el cas de mescles amb aigua, formaldehid i metanol, combinades amb gasos no condensables com l' N_2 , O_2 o CO .

Component	Type	Group
Methanol	Pure Component	
Nitrogen	Pure Component	
Oxygen	Pure Component	
H2O	Pure Component	
CO	Pure Component	
Formaldehyde	Pure Component	
Status: OK		

Figura 11.6.1. Llista de components en el programa Aspen HYSYS.

Fluid Package	Component List	Property Package	Status
Basis-1	Component List - 1 [HYSYS Datab	NRTL - Ideal	Input Complete

Figura 11.6.2. Selecció del paquet termodinàmic NRTL-PR a Aspen HYSYS.

A continuació s'accedeix a *Simulation* per introduir les corrents d'entrada a la columna T-401. L'entrada de gasos per cues de la columna és la corrent de sortida resultant de l'evaporador E-202, mentre que per l'entrada a caps de la columna entra el fluid absorbent, en aquest cas l'aigua, per que el líquid que entra per la part superior de la columna pugui sortir per cues amb el formaldehid absorbit aquest ha d'entrar a una pressió igual o lleugerament superior a l'entrada dels gasos per cues i així evitar riscos de contrafluxos. Gràcies a aquesta configuració s'afavoreix el contacte entre fases i la transferència de formaldehid cap a la fase absorbent.

Material Stream: 9'			
Worksheet	Attachments	Dynamics	
Worksheet	Stream Name	9'	Vapour Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	1,0000	1,0000
Properties	Temperature [C]	150,0	150,0
Composition	Pressure [kPa]	123,0	123,0
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	1604	1604
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	4,439e+004	4,439e+004
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	52,82	52,82
User Variables	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-3,090e+004	-3,090e+004
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	198,0	198,0
Cost Parameters	Heat Flow [kJ/h]	-4,955e+007	-4,955e+007
Normalized Yields	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	<empty>	<empty>
Emissions	Fluid Package	Basis-1	

Figura 11.6.3. Condicions corrent gasos d'entrada a T-401

Material Stream: Water		
Worksheet Attachments Dynamics		
Worksheet	Stream Name	Water
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0,0000
Properties	Temperature [C]	20,00
Composition	Pressure [kPa]	123,0
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	569,0
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	1,025e+004
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	10,27
User Variables	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2,853e+005
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	5,276
Cost Parameters	Heat Flow [kJ/h]	-1,623e+008
Normalized Yields	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	10,10
Emissions	Fluid Package	Basis-1

Figura 11.6.4. Condicions corrent d'entrada aigua a T-401

Un cop definit els corrents d'entrada, en la pestanya de la columna T-401, indiquem el nombre d'etapes d'equilibri, les etapes d'entrada dels corrents i les pressions dels corrents de sortida.

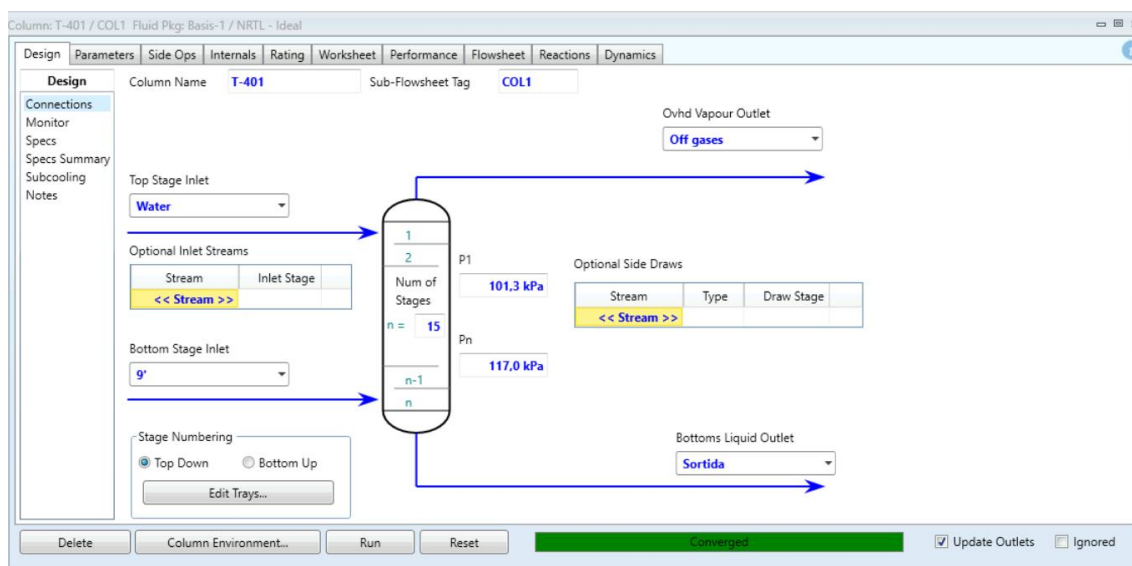
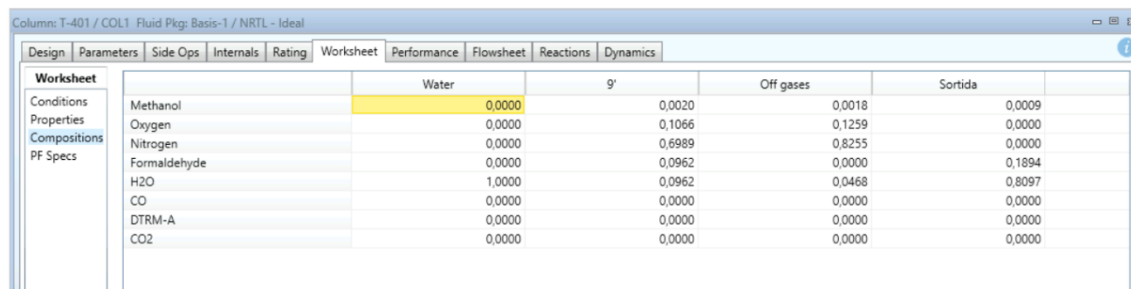


Figura 11.6.5. Connections columna T-401

Un cop, ja esta tot definit s'executa la simulació mitjançant el botó *Run*. Aspen HYSYS dona per correncte la simulació quan aquesta convergeix correctament. En cas contrari, cal revisar les especificacions, el nombre d'etapes seleccionades o les condicions d'entrada de les corrents.

Un cop la simulació ha convergit, es poden consultar els resultats principals de la columna, com ara les temperatures i pressions al llarg de les etapes, els cabals dels

corrents de sortida i les composicions finals. Aquests resultats permeten comprovar l'eficàcia de l'absorció i verificar que el formaldehid s'ha transferit majoritàriament cap al corrent líquid.



	Water	g'	Off gases	Sortida
Methanol	0,0000	0,0020	0,0018	0,0009
Oxygen	0,0000	0,1066	0,1259	0,0000
Nitrogen	0,0000	0,6989	0,8255	0,0000
Formaldehyde	0,0000	0,0962	0,0000	0,1894
H2O	1,0000	0,0962	0,0468	0,8097
CO	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
DTRM-A	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
CO2	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Figura 11.6.6. Composicions dels corrents d'entrada i sortida de T-401

11.6.2. Dimensionament de la columna d'absorció:

Un cop simulada la columna es procedeix a el dimensionament d'aquesta.

Per el disseny de la columna d'absorció s'han tingut les següents consideracions:

- Es treballa amb una columna empacada.
- L'empacament es tracta d'anells de Raschig de ¾ de polzada amb un gruix de 1/32 polzades.

El primer pas per el dimensionar la columna d'absorció és el càlcul del seu diàmetre.

Per trobar el diàmetre s'utilitza la referencia [11]. A continuació es mostra els passos que s'han de seguir:

$$K_4 = \frac{13.1 \cdot (G^*)^2 \cdot Fp \cdot \left(\frac{\mu_L}{\rho_L}\right)^{0.1}}{\rho_G \cdot (\rho_L - \rho_G)}$$

Equació 11.6.1

On:

- G^* : és la cabal del corrent de gas d'entrada màssica per unitat d'àrea. $\frac{kg}{m^2 \cdot s}$
- Fp : és la superfície específica del empacament en aquest cas $155 m^{-1}$.
- μ_L : és la viscositat del líquid en aquest cas l'aigua ($1 \cdot 10^{-3} Pa \cdot s$)
- ρ_G : és la densitat del gas que entra a la columna d'absorció. $\frac{kg}{m^3}$
- ρ_L : és la densitat del líquid que entra a la columna d'absorció. ($1000 kg/m^3$)

On G^* és:

$$G^* = \frac{G}{\frac{\pi}{4} \cdot Di^2}$$

Equació 11.6.2

On:

- G: és el cabal màssic del corrent d'entrada de gas a la columna d'absorció. ($\frac{kg}{s}$) en aquest cas 12.32kg/s
- Di: és el diàmetre interior de la columna d'absorció. (m^2)

Per trobar diàmetre interior de la columna primer s'ha de trobar el terme F_{LG} :

$$F_{LG} = \frac{L}{G} \cdot \sqrt{\frac{\rho_G}{\rho_L}}$$

Equació 11.6.3

On:

- L: és el cabal màssic del corrent líquid absorbent. $\frac{kg}{s}$

Abans de calcular el terme F_{LG} s'ha de calcular la densitat del gas, en el cas de la planta, la corrent d'entrada ve a una temperatura de 71.65°C i una pressió de 115.8 kPa. Per tant, la densitat del gas es calcula de la següent manera:

$$\rho_G = \frac{P \cdot M}{R \cdot T}$$

Equació 11.6.4

On:

- P: és la pressió d'entrada del gas a la columna d'absorció (Pa)
- M: és la massa molecular mitjana del gas en aquest cas ($27.05 \frac{kg}{kmol}$)
- R: és la constant per gasos ideals. $\frac{J}{kmol \cdot K}$
- T: és la temperatura d'entrada del gas a la columna d'absorció. (K) $\rho_G = \frac{120000 Pa \cdot 27.05 (\frac{kg}{kmol})}{8314 \frac{J}{kmol \cdot K} \cdot (273+150)K} = 1.00 \frac{kg}{m^3}$

Una vegada ja es té la densitat del gas ja es pot procedir al càlcul del terme F_{LG} : amb l'equació 11.6.3.

$$F_{LG} = \frac{10250 \frac{kg}{s}}{44357 \frac{kg}{s}} \cdot \sqrt{\frac{1.01 \frac{kg}{m^3}}{1000 \frac{kg}{m^3}}} = 0.01$$

Al trobar el terme F_{LG} , s'estableix una pèrdua de pressió de 42mmH₂O/m de rebliment. Gràcies això, es podrà trobar el terme K_4 en el següent gràfic:

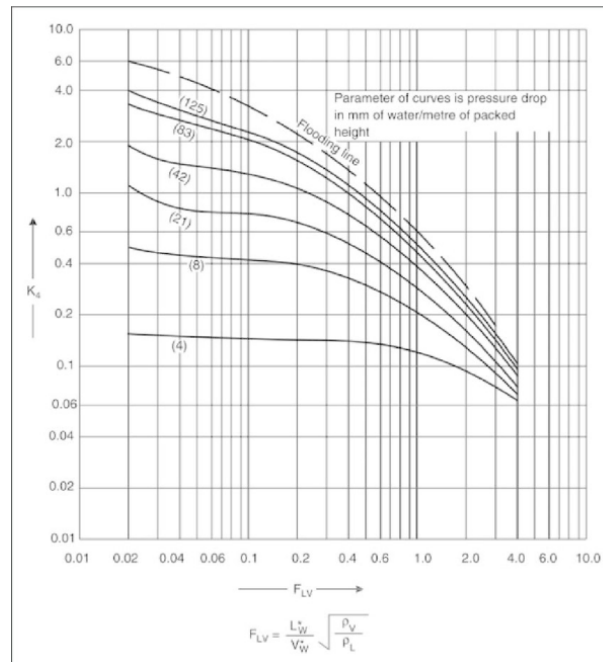


Figura 11.7: Extreta referencia [11]

A continuació, es troba que el valor de K_4 té un valor de 1.5, ara gràcies a l'equació 1 Absorció, es pot aïllar el terme G^* de l'equació:

$$1.5 = \frac{13.1 \cdot \left(G^* \frac{kg}{m^2 \cdot s}\right)^2 \cdot 504.5 m^{-1} \cdot \left(\frac{1 \cdot 10^{-3} Pa \cdot s}{1000 \frac{kg}{m^3}}\right)^{0.1}}{1.05 \cdot (1000 - 1.0) \frac{kg}{m^3}} \rightarrow G^* = 1.2 \frac{kg}{m^2 \cdot s}$$

Al trobar el terme G^* , s'afegeix a l'equació 11.6.2 i s'aïlla el diàmetre interior de la columna i es trobarà que:

$$Di = \sqrt{\frac{G^* \cdot \pi}{G \cdot 4}} = \sqrt{\frac{1.2 \frac{kg}{m^2 \cdot s} \cdot \pi}{12.3 \frac{kg}{s} \cdot 4}} = 3.61m$$

Per continuar amb el dimensionament de la columna, s'haurà de trobar l'altura d'aquesta amb la següent equació [5]:

$$h = NUT \cdot HUT = \left(\ln \left(\frac{Y_1}{Y_2} \right) + Y_1 - Y_2 \right) \cdot \left(\frac{\frac{G' \left(\frac{\text{mol}}{\text{s}} \right)}{A(\text{m}^2)}}{k_{ag} \left(\frac{\text{mol}}{\text{s} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{Pa}} \right) \cdot a \left(\frac{\text{m}^2}{\text{m}^3} \right) \cdot P_T (\text{Pa})} \right)$$

Equació 11.6.5

Sent NUT el número d'unitats de transferència i el HUT l'altura de la unitat de transferència.

On:

- Y_1 : adimensional (fracció molar, mol/mol)
- Y_2 : adimensional (fracció molar, mol/mol)
- G' : cabal màssic del gas inert (mol/s)
- A : àrea de la secció transversal (m²)
- k_{ag} : coeficient de transferència de matèria (mol/(s·m²·Pa))
- a : àrea interfacial específica (superfície de contacte per unitat de volum de columna) (m²/m³) en aquest cas escollim 110 m²/m³ donat a que es un valor molt comú per columnes d'absorció empacades d'anells Raschig.
- P_T : Pressió total (Pa)

El primer pas per calcular l'altura de la columna és calcular el nombre d'unitats de transferència o NUT. Abans de calcular el NUT, s'han de calcular el paràmetres Y_1 i Y_2 .

$$Y_n = \frac{y_{an}}{1 - y_{an}}$$

Equació 11.6.6

On y_{an} és la fracció molar de formaldehid en el gas a qualsevol punt de la columna d'absorció. Els subíndex 1 i dos equivalen a l'entrada y sortida del gas respectivament.

$$Y_1 = \frac{y_{a1}}{1 - y_{a1}} = \frac{0.0962}{1 - 0.0962} = 0.11$$

Per calcular el paràmetre Y_2 , s'ha agafat una fracció molar de formaldehid a la sortida dels gasos molt propera a 0, $y_{a2}=10^{-5}$.

$$Y_2 = \frac{y_{a2}}{1 - y_{a2}} = \frac{10^{-5}}{1 - 10^{-5}} = 10^{-6}$$

Una vegada trobats els coeficients adimensionals paràmetres Y_1 i Y_2 , es procedeix al càlcul del NUT, substituint els valors trobats en la part del NUT de l'equació 11.6.5:

$$NUT = \ln\left(\frac{Y_1}{Y_2}\right) + Y_1 - Y_2 = \ln\left(\frac{0.11}{10^{-6}}\right) + 0.11 - 10^{-6} = 11.72$$

A continuació, es procedeix al càlcul del HUT. Abans de calcular el HUT, s'han de determinar els valors dels diferents paràmetres dels qual depèn. El primer serà cabal màssic del gas inert, la qual és la corrent de sortida del gas de la columna d'absorció sense formaldehid (N₂, O₂, metanol que no ha estat absorbit, i CO).

$$G' = 311.38 + 47.2 + 0.81 + 0.29 = 359.5 \frac{\text{mols}}{\text{s}}$$

El següent paràmetre a calcular és l'àrea de la columna d'absorció:

$$A = \frac{\pi}{4} \cdot Di^2$$

Equació 11.6.7

On:

- A: és l'àrea de la columna d'absorció (m²)

Di : és el diàmetre interior de la columna d'absorció (m) $A = \frac{\pi}{4} \cdot 3.61^2 = 10.23 \text{m}^2$

Per obtenir el valor de kag , s'utilitza la següent correlació empírica (Jozef Gerhardus Maria Winkelman, 2003):

$$Sh_g = 0.163 \cdot Re_g^{0.7} \cdot Sc_g^{0.5}$$

Equació 11.6.8

On:

- Sh : és el número de Sherwood
- Re : és el número de Reynolds
- Sc : és el número de Schmidt

Tots tres són coeficients adimensionals, per tant, no tenen unitats. El primer coeficient adimensional, que es calcula, és el número de Reynolds:

$$Re = \frac{4 \cdot W_m}{\mu \cdot \pi \cdot Di}$$

Equació 11.6.9

On:

- Re : és el número de Reynolds
- W_m : és el cabal màssic total del líquid que entra en la columna d'absorció (kg/s)
- μ : és la viscositat dinàmica del fluid (Pa·s), aquest valor s'ha trobat gracies a fer el promig entre l'entrada i la sortida del gas viscositat dels corrents que ens dona Aspen Hysys®.
- Di : és el diàmetre intern de la columna d'absorció (m)

$$Re = \frac{4 \cdot 2.85 \frac{kg}{s}}{2 \cdot 10^{-5} \cdot \pi \cdot 3.61m} = 50259$$

Calculat el número de Reynolds, el següent pas es calcular el número de Schmidt, però abans d'això s'ha de calcular la difusivitat del formaldehid en el gas, com treballem amb excés d'aire, es pot considerar que el gas és aire. Per el càlcul de la difusivitat, s'utilitza la correlació empírica [3].

$$D_{12} = \frac{0,1013 \cdot T(K)^{1,75} \cdot \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}\right)^{0,5}}{P(atm) \cdot [(\sum v_1)^{1/3} + (\sum v_2)^{1/3}]^2}$$

Equació 11.6.10

On:

- D_{12} : coeficient de difusivitat binària del formaldehid en l'aire (m²/s)
- T : temperatura (K)
- P : Pressió (atm)
- M_1 : massa molecular del formaldehid (g/mol)
- M_2 : massa molecular del aire (g/mol)

- Σv_1 : suma dels volums atòmics de difusió de Fuller per al formaldehid (cm^3/mol)
- Σv_2 : suma dels volums atòmics de difusió de Fuller per l'aire (cm^3/mol)

Mitjançant la taula següent [3], es pot calcular els valors de Σv_1 i Σv_2 :

Taula 11.6.1: Contribució de grups per la determinació del paràmetre Σv [3]

Atomic and structural diffusion-volume increments v			
C	16.5	Cl	(19.5)
H	1.98	S	(17.0)
O	5.481	Aromatic ring	-20.2
N	(5.69)	Heterocyclic ring	-20.2
Diffusion volumes for simple molecules			
H ₂	7.07	CO	18.9
D ₂	6.70	CO ₂	26.9
He	2.88	N ₂ O	35.9
N ₂	17.9	NH ₃	14.9
O ₂	16.6	H ₂ O	12.7
Air	20.1	CCl ₂ F ₂	(114.8)
Ar	16.1	SF ₆	(69.7)
Kr	22.8	Cl ₂	(37.7)
Xe	(37.9)	Br ₂	(67.2)
		SO ₂	(41.1)

Gràcies a la taula anterior es troba que $\Sigma v_1=25.94$ i $\Sigma v_2=20.1$.

$$D_{12} = \frac{0,1013 \cdot (408)^{1,75} \cdot \left(\frac{1}{30} + \frac{1}{29}\right)^{0,5}}{117000 \cdot [(25.94)^{1/3} + (20.1)^{1/3}]^2} = 2.1 \cdot 10^{-4} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

A continuació és procedeix al càlcul del número de Schmidt:

$$Sc = \frac{\mu}{D_{12} \cdot \rho_g}$$

Equació 11.6.11

On:

- D_{12} : coeficient de difusivitat binària del formaldehid en l'aire (m^2/s)
- μ : és la viscositat dinàmica del fluid ($\text{Pa} \cdot \text{s}$), aquest valor s'ha trobat gracies a les propietats dels corrents que dona Aspen Hysys®.
- ρ_g : és la densitat del gas (kg/m^3)

$$Sc = \frac{2 \cdot 10^{-5} Pa \cdot s}{2.1 \cdot 10^{-4} \frac{m^2}{s} \cdot 1.00 \frac{kg}{m^3}} = 0.1$$

Ja calculat el número de Schmidt, es procedeix amb el càlcul del número de Sherwood:

$$Sh_g = 0.163 \cdot 57536^{0.7} \cdot 0.1^{0.5} = 110.7$$

Sabent el número de SHerwood i la difusivitat del formaldehid en el gas, podem trobar el coeficient de transferència de matèria (kag):

$$Sh = \frac{k_{ag} \cdot D_i}{D_{12}}$$

Equació 11.6.12

On:

- Sh : és el número de Sherwood.
- k_{ag} : coeficient de transferència de matèria (m/s)
- D_{12} : coeficient de difusivitat binària del formaldehid en l'aire (m²/s)

D_i : és el diàmetre intern de la columna d'absorció A partir de l'equació 9, aïllem el terme k_{ag} :

$$k_{ag} = \frac{Sh \cdot D_{12}}{D_i} = \frac{110.7 \cdot 2.1 \cdot 10^{-4}}{3.61} = 0.008 \frac{m}{s}$$

Per el càlcul del HUT, les unitats de k_{ag} han de ser mol/(s·m²·Pa), per tant és procedeix al canvi d'unitats:

$$k_{ag} = \frac{k_{ag} \left(\frac{m}{s} \right) \cdot \rho_{molecular} \left(\frac{mol}{m^3} \right)}{P(Pa)} = \frac{0.008 \frac{m}{s} \cdot 38.87 \frac{mol}{m^3}}{117000 Pa} = 2.66 \cdot 10^{-6} \frac{mol}{Pa \cdot m^2 \cdot s}$$

Finalment, es procedeix al càlcul del HUT de l'equació 11.6.5:

$$HUT = \frac{\frac{G' \left(\frac{mol}{s} \right)}{A(m^2)}}{k_{ag} \left(\frac{mol}{s \cdot m^2 \cdot Pa} \right) \cdot a \left(\frac{m^2}{m^3} \right) \cdot P_T (Pa)} = \frac{\frac{359.5}{10.23}}{2.66 \cdot 10^{-6} \cdot 110 \cdot 117000} = 1.02$$

Ara substituïm els valors en l'equació 11.6.5 i trobem que :

$$h = NUT \cdot HUT = 11.72 \cdot 1.02 = 12.03m$$

Per l'equip real es donarà un 20% de sobre dimensionament.

11.6.3. Aplicació del codi ASME al disseny de les columnes d'absorció:

Una vegada s'ha dimensionat la columna d'absorció, es procedeix amb l'aplicació del codi ASME [per calderes i recipients a pressió, concretament la Secció VIII, Divisió 1] [10], per a determinar altres paràmetres de disseny d'aquestes, així com per exemple el gruix que han de presentar les seves parets.

- El material que s'ha decidit utilitzar per construir les columnes de absorció és el l'acer AISI316L. Com es treballa amb formaldehid, component el qual és corrosiu s'ha de tenir en compte que el material amb el qual es vol treballar pugui suportar aquest component. Així doncs, s'ha escollit aquest material que destaca per a la seva resistència contra components corrosius i el fet de ser més econòmics que altres aliatges.

A continuació, és calcula la pressió de disseny i la temperatura de disseny:

$$P_D = P_{operació} \cdot 1.1 = 1.27 atm = 18.66 psi$$

Equació 11.6.13

Com la pressió de disseny es menor a 30 psi, s'agafarà com la pressió de disseny 30 psi.

$$T_D = T_{\max \text{ operació}} + 40 = 190^{\circ}C$$

Equació 11.6.14

A continuació és calcula el gruix de la part cilíndrica de la columna d'absorció amb la següent equació:

$$t = \frac{P_D \cdot R}{S \cdot E - 0.6 \cdot P_D} + C$$

Equació 11.6.15

On:

- t: és el gruix de la columna d'absorció (in)
- S: és la tensió màxima permissible (psi) [9]
- R: és el radi de la carcassa (inch) amb el sobredimensionament
- E: és el factor de soldadura
- PD: és la pressió de disseny (psi)
- C: factor de corrosió (1.5 mm)

$$t = \frac{30 \cdot 63}{16700 \cdot 0.85 - 0.6 \cdot 30} + 0.059 = 0.192 \text{ inch} = 4.9$$

El gruix de la part cilíndrica serà de 5 mm.

Una vegada calculat el gruix de la part cilíndrica, es calcula l'espessor del capçal i del fons de la columna d'absorció. S'ha escollit un fons i un capçal el·lipsoidal, per tant, el gruix es determina amb la següent equació:

$$t = \frac{P_D \cdot D}{2 \cdot S \cdot E - 0.2 \cdot P_D} + C$$

Equació 11.6.16

- t: és el gruix de la columna d'absorció (in)
- S: és la tensió màxima permissible (psi)
- D: és el diàmetre de la carcassa (inch) amb el sobredimensionament
- E: és el factor de soldadura
- PD: és la pressió de disseny (psi)
- C: factor de corrosió (1.5 mm)

$$t = \frac{30 \cdot 63 \cdot 2}{2 \cdot 16700 \cdot 0.85 - 0.2 \cdot 30} + 0.059 = 0.192 \text{ inch} = 4.9 \text{ mm}$$

El gruix tant del capçal com del fons serà de 5 mm.

11.7. Disseny dels bescanviadors de calor i evaporadors:

En METAFORM, donada la quantitat de bescanviadors de calor i evaporadors que hi ha al projecte de la planta s'ha utilitzat el simulador Aspen HYSYS. Aquest programa permet dimensionar els diferents equips d'una manera eficient i molt detallada, gràcies a l'amplia gama de paquets termodinàmics, bases de dades, etc.

11.7.1.Dimensionament dels bescanviadors i evaporadors

En aquest apartat es detalla el procediment per el dimensionament dels bescanviadors en la planta de METAFORM.

El primer pas, és definir els paràmetres tèrmics de l'equip: el cabal del fluid calent i del fluid fred, les temperatures d'entrada i sortida de cada fluid, la pressió d'entrada de cada fluid, i el diferencial de pressió permès per carcassa i tubs.

Un cop determinada les característiques dels fluids, és selecciona el tipus de bescanviador, en el cas de la planta METAFORM, tots els equips s'han escollit de tipus TEMA BEM amb bafles double segmental, tot plegat construït en acer 316L.

El simulador Aspen HYSYS usa el mètode de Kern per el dimensionament del bescanviador i així ajustar la geometria del equip fins complir el balanç energètic.

Per l'exemple de dimensionament, s'ha escollit el bescanviador I-401.

El primer pas es escollir per on circularan els fluids:

- El fluid més brut circula per l'interior dels tubs, perquè la neteja mecànica o mitjançant vapor o aigua és més senzilla.
- El fluid més corrosiu circula per l'interior dels tubs, i així minimitzar el contacte amb la metallúrgia.
- El fluid amb major pressió és situa per l'interior dels tubs, per així evitar pèrdues de càrrega.
- Si el fluid és molt viscos o es un gas, aquest circularà per carcassa.

En el cas del bescanviador I-401, treballa amb formaldehid, el qual es un component corrosiu, i utilitza aigua glicolada, fluid viscos. Per tant, la seva elecció es molt senzilla, la solució de formaldehid circularà per tubs i l'aigua glicolada per la carcassa.

A continuació, es selecciona el model Rigorous Shell&Tubes del simulador d'Aspen HYSYS i s'obra el navegador EDR. Aquí es va a la pestanya de procés data, i s'omplen els camps necessaris per cada fluid.

		HotSide	ColdSide	Recent	
				HotSide	ColdSide
Calculation mode: Simulation					
Process Conditions					
Mass flow rate	kg/h	12662	65000	12662	65000
Mass flow rate multiplier	?				
Inlet pressure	kPa	101,325	120	101,325	120
Outlet pressure	kPa	90,312	108,8	99,874	108,644
Pressure at liquid surface in column	kPa				
Inlet Temperature	°C	65,08	5	65,08	5
Outlet Temperature	°C		12	18,88	16,13
Inlet vapor mass fraction		1,811996E-05	0	1,811996E-05	0
Outlet vapor mass fraction				0	0
Heat exchanged	kW			608,9	
Heat exchanged multiplier	?				
Process Input					
Allowable pressure drop	kPa	11,013	24	11,013	24
Fouling resistance	m ² -K/W	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
Calculated Results					
Pressure drop	kPa			1,451	11,356

Figura 11.7.1. Especificacions del procés

A continuació s'accedeix a l'apartat de geometry i definim totes les característiques del bescanviador, el TEMA, el tipus de baffle, el material de construcció, el diàmetre extern dels tubs i el pitch i la seva disposició.

		Simulation	Recent
Configuration			
TEMA Type	B - E - M	BEM	
Tube layout option	New (optimum) layout	New (optimum) layout	
Location of hot fluid	Tube side	Tube side	
Tube OD / Pitch	mm 33,4 / 41,75	33,4 / 41,75	
Tube pattern	30-Triangular	30	
Tubes are in baffle window	Yes	Yes	
Baffle type	Double segmental	Double segmental	
Baffle cut orientation	Vertical	V	
Default exchanger material	SS 316L 9	SS 316L	

Figura 11.7.2. Especificacions de la geometria del equip

En la barra del simulador, és selecciona *Design (Sizing)*, es dona a *RUN* i el programa ens dissenya un bescanviador que compleixi les condicions donades.



Figura 11.7.3. Barra del simulador

Un cop s'ha dissenyat el bescanviador, en la mateixa barra és selecciona *Rating/Checking*, anem a la pestanya d'*Errors & Warnings* i es s'analitzen els errors o avisos donats per el programa.

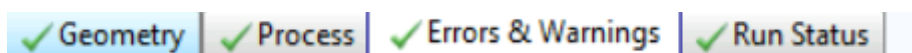


Figura 11.7.4. Errors & Warnings

Un cop analitzats els errors i avisos donats per el programa, en el mode *Rating/Checking* es pot modificar la carcassa per solucionar-los.

Size			
Specify some sizes for Design			
Shell ID / OD	mm	600	610
Tube length	mm	5250	5250
Baffle spacing center-center (Bc)	mm	145	145
Number of baffles		33	33
Number of tubes / Tube passes		138 / 4	138 / 4
Shells in series		1	1
Shells in parallel		1	1
Overall Results			
Excess surface (%)			0
Dp-ratio Shellside / Tubeside		0,4732 /	0,1317
Total cost (all shells)	Dollar(US)		51138

Figura 11.7.5. Geometria de la carcassa

Finalment, s'observen els resultats de la geometria de la carcassa i es validen segons Towler & Sinnot [4], on aquest ens diu que la relació geomètrica entre la longitud dels tubs i el diàmetre de la carcassa ha de ser entre 5-10. A més a més, una altre mètode de validació és analitzar les velocitats dels fluid i veure si estan dins dels seus rangs respectius.

Taula 11.7.1. Velocitats dels fluids[4]

Tipus de fluids	Tram de circulació	Velocitat (m/s)
Líquids no viscosos	Canonada aspiració (abans de la bomba)	0.6-0.9
	Canonada impulsió (després de la bomba)	1.2-3
Líquids viscosos	Canonada aspiració (abans de la bomba)	0.06-0.25
	Canonada impulsió (després de la bomba)	0.15-0.6
Gas o aire		9-16
Vapor		9-30

Els resultats de tots els bescanviadors i evaporadors és pot observar en el *Capítol 2.Equips*.

11.8. Disseny del reactor catalític oxidatiu:

11.8.1. Dimensionament del reactor:

Aquest reactor, és un reactor catalític de llit fix. Per tant, el seu dimensionament és molt semblant al d'un cilindre. Gràcies a aquesta simplificació, es pot dimensionar el reactor catalític.

Per el càlcul de l'altura i el diàmetre del reactor, s'agafa una relació H/D de 1. S'agafa aquest valor, perquè l'altura del llit és proporcional a la pèrdua de carga a través d'aquest. Agafar aquest valor de la relació implica un llit més curt i més ample cosa que redueix la velocitat superficial del gas i, per tant, la pèrdua de càrrega.

El primer pas, és el càlcul del volum del llit, el qual es troba amb la següent equació:

$$V_{llit} (m^3) = \frac{Q \left(\frac{m^3}{h} \right)}{GHSV (h^{-1})}$$

Equació 11.8.1

On:

- V_{llit} : Volum del llit (m³)
- Q : Cabal de gas (m³/h)
- $GHSV$: Velocitat espacial horària del gas. (h⁻¹)

Per procedir amb el càlcul del volum del llit, es suposa una velocitat espacial horària del gas. En el cas de la planta METAFORM, el component limitant en aquest reactor és el CO. El CO és el compost més difícil d'oxidar de la mescla, per garantir una conversió superior al 99.5% de CO amb un catalitzador de Pt/Pd/Al₂O₃ a temperatures de 220–270 °C, segons la referencia [16] es recomana un GHSV ≤ 10 000 h⁻¹.

$$V_{llit} (m^3) = \frac{38270.3 \left(\frac{m^3}{h} \right)}{8000 (h^{-1})} = 4.78 m^3$$

A continuació es calcula el diàmetre del reactor:

$$V_{llit} (m^3) = \frac{\pi}{4} \cdot D_{int}^2 (m) \cdot H (m)$$

Equació 11.8.2

On:

- V_{llit} : Volum del llit (m³)
- D_{int} : Diàmetre del llit (m)
- H: Altura del llit (m)

Com en aquest cas s'ha escollit una relació H/D igual a 1, l'altura del llit és igual al diàmetre del llit, per tant, aïllem l'equació 11.8.2, i trobem el següent:

$$D_{int} = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot V_{llit}}{\pi}} = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot 4.78 \text{ m}^3}{\pi}} = 1.825 \text{ m}$$

L'altura i el diàmetre interior del reactor són de 1.825 m, ara s'aplica el factor de seguretat del 10% de sobre dimensionament, i surt que l'altura i el diàmetre interior són 2m .

11.8.2. Aplicació del codi ASME al disseny de reactors:

Una vegada s'ha dimensionat el reactor, es procedeix amb l'aplicació del codi ASME [per calderes i recipients a pressió, concretament la Secció VIII, Divisió 1], per a determinar altres paràmetres de disseny d'aquestes, així com per exemple el gruix que han de presentar les seves parets.

- El material que s'ha decidit utilitzar per construir les columnes de absorció és el l'acer AISI316L.

A continuació, és calcula la pressió de disseny i la temperatura de disseny:

$$P_D = P_{operació} \cdot 1.1 = 2.06 \text{ atm} = 30.3 \text{ psi}$$

Equació 11.8.3

Com la pressió de disseny es menor a 30 psi, s'agafarà com la pressió de disseny 30 psi.

$$T_D = T_{\max \text{ operació}} + 50 = 350^\circ\text{C}$$

Equació 11.8.4

A continuació és calcula el gruix de la part cilíndrica del reactor amb la següent equació:

$$t = \frac{P_D \cdot R}{S \cdot E - 0.6 \cdot P_D} + C$$

Equació 11.8.5

On:

- t: és el gruix de la columna d'absorció (in)
- S: és la tensió màxima permissíble (psi) [9]
- R: és el radi de la carcassa (inch) amb el sobredimensionament
- E: és el factor de soldadura
- PD: és la pressió de disseny (psi)
- C: factor de corrosió (1.5 mm)

$$t = \frac{30.3 \cdot 39.37}{16700 \cdot 0.85 - 0.6 \cdot 30.3} + 0.059 = 0.143 \text{ inch} = 3.63 \text{ mm}$$

El gruix de la part cilíndrica serà de 5 mm.

Ara, es calcula l'espessor del capçal i del fons del reactor. S'ha escollit un fons i un capçal el·lipsoidal, per tant, el gruix es determina amb la següent equació:

$$t = \frac{P_D \cdot D}{2 \cdot S \cdot E - 0.2 \cdot P_D} + C$$

Equació 11.8.6

- t: és el gruix de la columna d'absorció (in)
- S: és la tensió màxima permissíble (psi)
- D: és el diàmetre de la carcassa (inch) amb el sobredimensionament
- E: és el factor de soldadura
- PD: és la pressió de disseny (psi)
- C: factor de corrosió (1.5 mm)

$$t = \frac{30.3 \cdot 39.37 \cdot 2}{2 \cdot 16700 \cdot 0.85 - 0.2 \cdot 30} + 0.059 = 0.142 \text{ inch} = 3.61 \text{ mm}$$

El gruix tant del capçal com del fons serà de 5 mm.

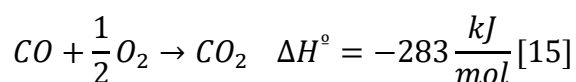
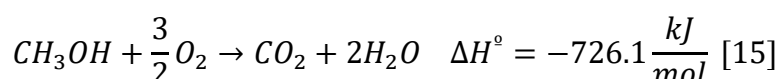
11.8.3. Calor generat per el reactor:

Per tal de dimensionar correctament el reactor catalític d'alúmina, és imprescindible quantificar l'energia alliberada durant el procés. Les reaccions

d'oxidació del metanol i del monòxid de carboni són fortament exotèrmiques, fet que té implicacions directes sobre el disseny tèrmic del sistema.

En aquest apartat es calcula la calor de reacció associada a la combustió de les corrents d'entrada, que consisteixen en 92,5 kg/h de metanol i 32 kg/h de monòxid de carboni. A partir dels cabals molars i de les entalpies estàndard de reacció de cadascuna de les espècies, el calor alliberat al reactor. Un cop es troba el calor emès per les reaccions es procedeix al càlcul del salt tèrmic del reactor.

Les reaccions que ocorren en el reactor són les següents:



A continuació es calcula el calor generat per les diferents reaccions amb l'equació següent:

$$Q = n \cdot \Delta H^\circ$$

Equació 11.8.7

On;

- Q: és el calor generat (kJ/h)
- n: és el cabal molar (mol/h)
- ΔH° : és l'entalpia de la reacció (kJ/mol)

Per tant:

$$Q_1 = 2890.6 \frac{mol}{h} \cdot 726.1 \frac{kJ}{mol} = 2097734 \frac{kJ}{h} = 582.7 kW$$

$$Q_2 = 1142.9 \frac{mol}{h} \cdot 283 \frac{kJ}{mol} = 323441 \frac{kJ}{h} = 89.85 kW$$

Un cop calculat el calor cedit per la reacció, es procedeix al càlcul del salt tèrmic:

$$\Delta T = \frac{Q}{m \cdot C_p}$$

Equació 11.8.8

On:

- Q: calor de reacció (kJ/h)
- m: cabal màssic (kg/h)
- Cp: calor específica del fluid (kJ/h)

Per tant:

$$\Delta T = \frac{2421175 \frac{kJ}{h}}{44087 \frac{kg}{h} \cdot 1.1 \frac{kJ}{kg \cdot K}} = 49^{\circ}C$$

La corrent de sortida del reactor RC-501 serà de 269°C.

11.9. Canonades i bombes

11.9.1. Dimensionament de canonades

Per determinar el diàmetre intern de la canonada s'han suposat unes velocitats típiques per a la circulació de líquids, vapor i gas, les quals es poden veure a la figura 11.7.1

Un cop s'ha escollit la velocitat típica y s'obté el cabal volumètric del fluid que circula per la canonada, es calcula el diàmetre intern requerit de la canonada amb la següent expressió:

$$Din = \sqrt{\frac{Q}{\frac{\pi}{4} \cdot v}}$$

Equació 11.9.1

On:

- Din: Diàmetre intern de la canonada (m)
- Q: Cabal volumètric (m^3/s)
- V: velocitat típica del fluid (m/s)

Un cop es té el diàmetre intern requerit, es calcula el diàmetre intern real de la canonada amb els valors del diàmetre nominal y el Schedule de la canonada. A la taula 11.9.1 es mostren els diferents valors del diàmetre nominal així com el seu gruix real. En el nostre cas utilitzarem el SCH 40 que és el utilitzat comunament en les nostres condicions.

$$Din \text{ real} = OD - 2 \cdot \Delta x$$

Equació 11.9.2

On:

- Din real: diàmetre intern real de la canonada (mm)
- OD: diàmetre extern de la canonada (mm)
- Δx: Gruix de la canonada (mm)

Amb el valor real del diàmetre intern, es calcula la velocitat real del fluid per assegurar-se que esta dins del rang mostrat a la taula de les velocitats típiques.

$$v = \frac{Q}{\frac{\pi}{4} * D^2}$$

Equació 11.9.3

On:

- v: velocitat real del fluid (m/s)
- Q: cabal volumètric (m^3/s)
- D: diàmetre intern real de la canonada (m)

11.9.2. Exemple càlcul de canonades

A continuació, es fa un exemple del càlcul del diàmetre intern per una canonada per on circula metanol, concretament: DN50-A1-200

$$Din = \sqrt{\frac{0.018}{\frac{\pi}{4} * 1.5}} = 0.0388 \text{ m} = 38.8 \text{ mm}$$

$$Din = 38.8 \text{ mm} \rightarrow De = 48.3 \text{ mm y } \Delta x = 3.7 \text{ mm}$$

$$Din \text{ real} = 48.3 - (2 * 3.7) = 40.9 \text{ mm (DN40)}$$

$$v \text{ real} = \frac{0.018}{\frac{\pi}{4} * (\frac{40.9}{1000})^2} = 1.3 \text{ m/s}$$

Com la velocitat obtinguda esta dins del rang de velocitats típiques en el tram d'impulsió, es conclou que el DN escollit es l'apropiat. En el cas de que la velocitat obtinguda al resultat estigues fora del rang, s'hauria de escollir una altre diàmetre extern hauria de escollir una altre diàmetre extern i refer els càlculs.

Taula 11.9.1. Diàmetre nominal, Schedule, diàmetre extern y espesor de una canonada d'acer inoxidable segons ASME B36.19M^[18]

Diametro Nominal		Diam. Ext.	Especor. Wall thickness (mm) Peso. Weight (Kg/meter)																		
Nominal Pipe Size NPS	Nominal Diameter DN	Outside Diametermm	SCH 5S	SCH 5	SCH 10S	SCH 10	SCH 20	SCH 30	SCH 40S	STD	SCH 40	SCH 60	SCH 80S	XS	SCH 80	SCH 100	SCH 120	SCH 140	SCH 160	XXS	
%	6	10,3			1,24			1,45		1,73				2,41							
					0,27			0,32		0,37				0,47							
					0,28			0,32		0,37				0,48							
%	8	13,7			1,65			1,85		2,24				3,02							
					0,49			0,54		0,63				0,80							
					0,50			0,55		0,64				0,81							
%	10	17,2			1,65			1,85		2,31				3,20							
					0,63			0,70		0,85				1,10							
					0,64			0,71		0,86				1,12							
%	15	21,3	1,65		2,11			2,41		2,77				3,73					4,78	7,47	
			0,8		1,00			1,13		1,27				1,62					1,95	2,56	
			0,81		1,02			1,14		1,27				1,65					1,98	2,59	
%	20	26,7	1,65		2,11			2,41		2,87				3,91					5,56	7,82	
			1,02		1,28			1,44		1,68				2,20					2,89	3,64	
			1,03		1,30			1,46		1,71				2,23					2,94	3,69	
1	25	33,4	1,65		2,77			2,90		3,38				4,55					6,35	9,09	
			1,29		2,10			2,18		2,50				3,24					4,24	5,45	
			1,31		2,13			2,22		2,54				3,29					4,30	5,53	
1%	32	42,2	1,65		2,77			2,97		3,56				4,85					6,35	9,70	
			1,65		2,70			2,87		3,37				4,46					5,81	7,76	
			1,67		2,73			2,92		3,44				4,53					5,89	7,88	
1%	40	48,3	1,65		2,77			3,18		3,68				5,08					7,14	10,16	
			1,90		3,10			3,54		4,05				5,41					7,24	9,55	
			1,92		3,15			3,59		4,11				5,49					7,35	9,69	
2	50	60,3	1,65		2,77			3,18		3,91				5,54					8,74	11,07	
			2,39		3,93			4,48		5,44				7,49					11,12	13,45	
			2,42		3,99			4,55		5,52				7,60					11,29	13,66	
2%	65	73,0	2,11		3,05			4,78		5,16				7,01					9,53	14,02	
			3,69		5,26			6,05		6,64				11,41					14,92	20,40	
			3,75		5,35			6,17		6,77				11,59					15,15	20,72	
3	80	88,9	2,11		3,05			4,78		5,49				7,62					11,13	15,24	
			4,52		6,46			6,92		11,29				15,27					21,35	27,88	
			4,59		6,56			10,07		11,47				15,51					21,67	28,11	
3%	90	101,6	2,11		3,05			4,78		5,74				8,08						16,15	
			5,18		7,41			11,41		13,57				18,63						34,03	
			5,26		7,53			11,57		13,78				18,92						34,56	
4	100	114,3	2,11		3,05			4,78		6,02				8,56			11,13		13,49	17,12	
			5,84		8,37			12,91		16,08				22,32			28,32		33,54	41,03	
			5,93		8,50			13,11		16,32				22,67			28,75		34,05	41,66	
5	125	141,3	2,77		3,40					6,55				9,53			12,70		15,88	19,05	
			9,46		11,56					21,77				30,97			40,28		49,12	57,43	
			9,61		11,74					22,10				31,44			40,90		49,87	58,32	
6	150	168,3	2,77		3,40					7,11				10,97			14,27		18,26	21,95	
			11,31		13,82					28,26				42,56			54,20		67,55	79,21	
			11,48		14,04					28,69				43,21			55,03		68,59	80,43	
8	200	219,1	2,77		3,76		6,35	7,04		8,18		10,31		12,70		15,09	18,26	20,62	23,01	22,23	
			14,78		19,97		33,31	36,81		42,54		53,08		64,64		75,91	90,43	100,91	111,26	107,91	
			15,00		20,27		33,83	37,38		43,20		53,90		65,63		77,08	91,82	102,47	112,97	109,57	
10	250	273,1	3,40		4,19		6,35	7,80			9,27			12,70		15,09	18,26	21,44	25,40	28,58	
			22,81		27,78		41,76	51,02		60,30				81,54		95,99	114,73	133,03	155,12	172,30	
			22,96		28,21		42,41	51,81		61,23				82,79		97,47	116,50	135,08	157,51	174,95	
12	300	323,9	3,96		4,57		6,35	8,38		9,53		10,31	14,27	12,70		17,48	21,44	25,40	28,58	33,32	
			31,24		35,98		49,72	65,19		73,90		79,72	108,94	97,45		132,06	159,89	186,94	208,10	238,72	
			31,72		36,54		50,48	66,20		75,00		80,94	110,62	98,95		134,10	162,35	189,82	211,31	242,40	
14	350	355,6	3,96		4,78	6,35	7,92	9,53		9,53		11,13	15,09	12,70		19,05	23,83	27,79	31,75	35,71	

11.9.3. Càlcul de pressions per canonades

Pel disseny de les canonades es molt important saber quina és la màxima pressió admissible que pot suportar la canonada per temes de seguretat. En cap cas la canonada ha de superar aquesta pressió.

$$P_{mad} = \frac{2 * t * S_y * E}{D_{ext} - 2 * t * y}$$

Equació 11.9.4

On:

- P_{mad}: pressió màxima admissible interna de la canonada (MPa)
- t: gruix de la canonada (mm)
- E: factor de resistència per soldadures
- S_y: tensió màxima admissible (MPa)
- y: Coeficient del material en funció de la temperatura

Pel càlcul de la pressió de disseny de la canonada s'ha decidit que serà un 20% superior a la pressió d'operació. Per tant la expressió per calcular la pressió de disseny és:

$$P = P_o * 1.2$$

Equació 11.9.5

On:

- P: Pressió de disseny (bar)
- P_o: Pressió d'operació (bar)

11.9.4. Dimensionament bombes

Per dur a terme un correcte dimensionament de les bombes de METAFORM, s'han fet una sèrie de càlculs per garantir la eficiència y seguretat. Per començar es determina la carrega total de la bomba en el tram d'aspiració i impulsió. Per fer el càlcul s'utilitza la següent expressió:

$$h = \Delta z + \frac{1}{g} * \left(\frac{\Delta P}{\rho} + \frac{1}{2} + \frac{\Delta v^2}{\alpha} + ev \right)$$

Equació 11.9.6

On:

h: carrega total de la bomba (m)

Δz : diferencia d'altura entre el tram d'aspiració i el tram d'impulsió (m)

ΔP : diferència de pressió entre la entrada y sortida de la bomba (Pa)

Δv : diferència de velocitats entre el tram d'aspiració i impulsio (m/s)

α : constant de flux (0.5 si és laminar i 1 si és turbulent)

e_v : pèrdua de carrega total pels accidents i els trams rectes (J/Kg)

Per poder determinar si un flux és laminar o turbulent hem de calcular els Reynolds. Si el valor obtingut és mes petit que 2100 el règim serà laminar, en canvi si el valor és major a 4000 és tractarà d'un règim laminar. Si el valor resultant es troba entre els nombres mencionats anteriorment es tractarà d'un règim en transició.

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

Equació 11.9.7

On:

v : velocitat del fluid que circula per la canonada (m/s)

D : diàmetre intern de la canonada (m)

μ : viscositat del fluid (Kg/ms)

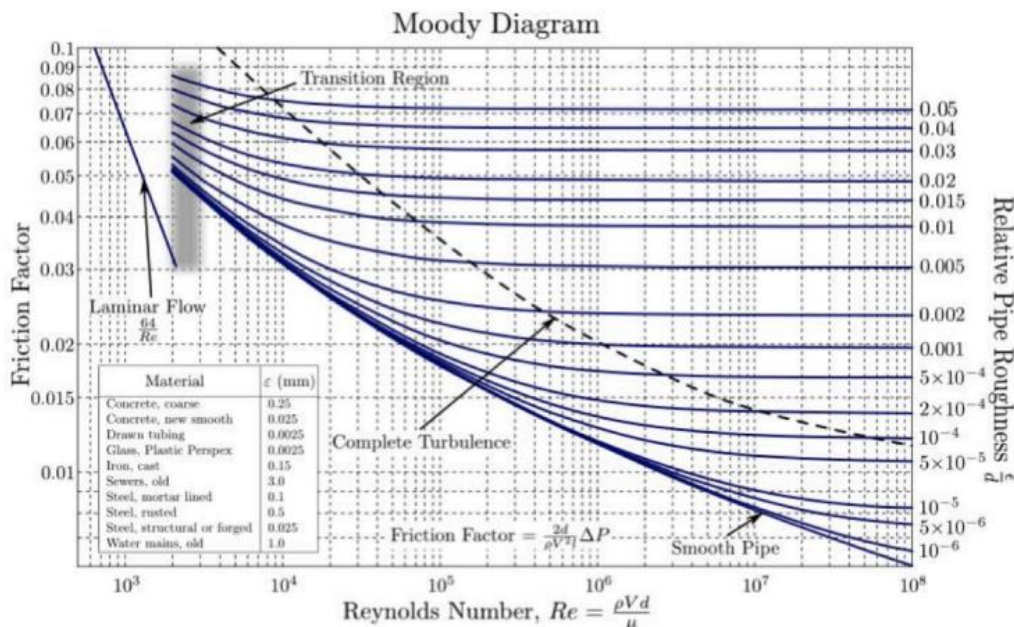
Un cop esta determinat el règim de circulació es determina el factor f , que fa referència a les pèrdues de carrega per fricció, que s'utilitzarà per calcular les pèrdues dels trams rectes. Aquest factor s'obté amb la figura 11.9.1, que amb la rugositat relativa (ϵ/D) es podrà definir. El valor utilitzat de rugositat relativa ve definit per la taula 11.9.2

Taula 11.9.2 Rugositats per diferents materials.

Material	Rugosidad (m)
Vidrio	Liso
Plástico	$3,0 \times 10^{-7}$
Tubo extruido, cobre, latón y acero	$1,5 \times 10^{-6}$
Acero comercial o soldado	$4,6 \times 10^{-5}$
Hierro galvanizado	$1,5 \times 10^{-4}$
Hierro dúctil recubierto	$1,2 \times 10^{-4}$
Hierro dúctil no recubierto	$2,4 \times 10^{-4}$
Concreto, bien fabricado	$1,2 \times 10^{-4}$
Acero Remachado	$1,8 \times 10^{-4}$

Un cop s'han trobat totes les dades necessàries es procedeix a determinar el factor de Fanning (f).

Figura 11.9.1 Abac de Moody^[19]



Ara que s'ha definit el factor f, es procedeix a fer el càlcul de les pèrdues de carrega totals que és el sumatori de les pèrdues dels accidents i els trams rectes.

$$ev = ev(\text{trams rectes}) + ev(\text{accidents})$$

Equació 11.9.8

Per una banda les pèrdues dels trams rectes es calculen tant per el tram d'impulsió com pel tram d'aspiració.

$$ev(\text{trams rectes}) = 4f * \frac{v^2}{2} * \frac{L}{D}$$

Equació 11.9.9

On:

f: factor de fricció de Fanning

v: velocitat del fluid (m/s)

L: llargada de la canonada (m)

D: diàmetre intern de la canonada (m)

Per poder calcular les pèrdues dels accidents dels trams d'aspiració i impulsió s'utilitzarà una altre expressió:

$$ev (accidents) = \sum K * \frac{v^2}{2}$$

Equació 11.9.10

On:

K: coeficient en funció del accident

v: velocitat del fluid (m/s)

Per saber quin coeficient utilitzar s'ha de consultar la taula 11.9.3:

Taula 11.9.3 Valors del coeficient pels diferents accidents.

ACCIDENT	K	ACCIDENT	K
Entrada/sortida circuit		Vàlvula de diafragma	
Entrada encanonada	0,78	oberta	2,3
Entrada cantells vius	0,50	¼ oberta	2,6
Entrada arrodonida	0,04	½ oberta	4,3
Sortida encanonada	1,00	¾ oberta	21,0
Sortida cantells vius	1,00	Vàlvula de seient	
Sortida arrodonida	1,00	oberta	9,0
Colzes/ Unions		¼ oberta	13,0
Colze de 45° standard	0,35	½ oberta	36,0
Colze de 45° gran curvatura	0,20	¾ oberta	112,0
Colze de 90° standard	0,75	Vàlvula angular oberta	2,0
Colze de 90° gran curvatura	0,45	Vàlvula de bola	
Colze de 90° petita curvatura	1,3	oberta	0,05
Corba de 180°	1,5	20°	1,56
T standard ús com a colze	1,0	40°	17,3
T standard amb bifurcació tancada	0,4	60°	206,0
T standard amb divisió de cabal	1,0 (a)	Vàlvula de papallona	
Unió roscada	0,04	oberta	0,24
Maneguet d'unió	0,04	20°	1,54
Vàlvula comporta		40°	10,8
oberta	0,17	60°	118,0
¾ oberta	0,90	Vàlvula de retenció (oberta)	
½ oberta	4,5	de frontissa (columpio, chamera)	2,0
¼ oberta	24,0	de bola	70,0
Cabalímetres mecànics		de disc	10,0
de disc	7,0	Canvi de diàmetre	
de pistó	15,0	Estretament/	** (b)
rotatori	10,0	Eixamplament	** (b)
de turbina	6,0		

Quan es tenen tots els valors necessaris es procedeix a calcular el valor de la càrrega total del sistema. Un cop tenim la càrrega es calcula la potencia de la bomba i després el NPSH disponible.

$$P = Q * \rho * g * h * 1/n$$

Equació 11.9.11

On:

P: potència real de la bomba (W)

Q: cabal volumètric (m³/s)

ρ : densitat del fluid (Kg/ m³)

g: gravetat de la terra (9.81 m/s²)

h: càrrega total de la bomba (m)

n: rendiment de la bomba (%)

$$NPSH_{disp} = \Delta z + \frac{1}{g} * \left[\left(\frac{P_1 - P_v}{\rho} \right) + \frac{v_1^2}{2\alpha} - ev \right]$$

Equació 11.9.12

On:

Δz : variació d'altura de l'equip (m)

P_1 : pressió del fluid al tram d'aspiració (Pa)

P_v : pressió vapor del fluid (Pa)

v_1 : velocitat del fluid en el tram d'aspiració (m/s)

α : coeficient de correcció cinètica

ev: pèrdua de càrrega al tram d'aspiració.

11.9.5. Exemple dimensionament bombes

Per el exemple s'utilitzarà el dimensionament de la bomba P-101.

Primer aconseguim les dades de cada tram i es calculen els Reynolds.

Taula 11.9.3 Dades tram aspiració

Aspiració	
Variable	Valor
D asp	0.0525
Vasp	0.8

Densitat	792
Viscositat	0.00059

Taula 11.9.4 Dades tram impulsió

Impulsió	
Variable	Valor
Dimp	0.0409
Vimp	1.3
Densitat	792
Viscositat	0.00059

$$Re_{asp} = \frac{792 * 0.8 * 0.0525}{0.00059} = 56379.66102$$

$$Re_{imp} = \frac{792 * 1.3 * 0.0409}{0.00059} = 71373.9661$$

Tal com s'ha explicat calculem la rugositat relativa de cada tram i utilitzem la figura 11.9.1 per treure el factor f

$$\frac{\varepsilon}{D}_{asp} = \frac{0.015}{52.5} = 0.0003$$

$$\frac{\varepsilon}{D}_{imp} = \frac{0.015}{40.9} = 0.00037$$

Al mirar la taula 11.9.1 s'observa que el valor de 4f per cada tram és 0.018 pel d'aspiració i 0.0175 pel d'impulsió.

Un cop es té els factors f de cada tram es calcula de les pèrdues dels trams rectes y accidents de el tram d'aspiració i impulsio:

$$ev(t.rasp) = 0.018 * \frac{109.3}{0.0525} * \frac{0.8^2}{2} = 11.99 \text{ m}^2/\text{s}^2$$

$$ev(t.rimp) = 0.018 * \frac{19.35}{0.0409} * \frac{1.3^2}{2} = 6.99 \text{ m}^2/\text{s}^2$$

$$ev(acc.asp) = (10 + 0.05 + 0.05 + 0.75 + 0.05 + 0.4 + 0.4 + 0.4 + 0.75) * \frac{0.8^2}{2} = 4.12 \text{ m}^2/\text{s}^2$$

$$ev(acc.imp) = (10 + 0.05 + 0.05 + 0.4 + 0.75 + 1) * \frac{1.3^2}{2} = 10.35 \text{ m}^2/\text{s}^2$$

Ara que ja es tenen tots els valors necessaris es calcula la carrega del sistema, aquest valor ajudarà a escollir el proveïdor de la bomba.

$$h = 0 + \frac{1}{9.81} * \left(\frac{150000 - 101325}{792} + \frac{1}{2} * \left(\frac{1.3^2}{1} - \frac{0.8^2}{1} \right) + 33.45 \right) = 9.73 \text{ m}$$

En última instància es calcula la potència real de la bomba mitjançant els següents càlculs, ja explicats anteriorment:

$$P = 0.001769 * 792 * 9.81 * 9.73 * \frac{1}{0.75} = 178.2 \text{ W}$$

11.10. Serveis

11.10.1. Consum de gas calderes

Per escalfar el Dowtherm A que s'utilitza en els bescanviadors I-201 i I-501, s'utilitzen calderes d'oli tèrmic que escalfen el gas en un circuit tancat. Aquestes calderes consumeixen gas natural per escalfar el Dowtherm A a la temperatura requerida.

Taula 11.10.1: Calor necessària pels diferents equips

Caldera	Calor bescanviat (kW)	Cabal Dowtherm A (kg/h)
CO-701	1456.1	125000
CO-702	772.9	110000

Ara es calcula el consum de gas de la caldera CO-701 com exemple, mitjançant la següent equació:

$$Consum\ GN \left(\frac{Nm^3}{h} \right) = \frac{Q\ (kW)}{PCI \left(\frac{kWh}{Nm^3} \right) \cdot \eta}$$

Equació 11.10.1

On:

- Q: és el calor bescanviat (kW)
- PCI: és el poder calorífic inferior del gas natural ($\frac{kWh}{Nm^3}$)
- η : és el rendiment de la caldera segons fabricant.

Es farà el exemple del càlcul per la caldera CO-701:

$$Consum\ GN \left(\frac{Nm^3}{h} \right) = \frac{1456.1\ kW}{10 \left(\frac{kWh}{Nm^3} \right) \cdot 0.92} = 158.27 \frac{Nm^3}{h}$$

Una vegada s'ha calculat el consum de gas natural de la caldera, es procedeix al càlcul de les emissions de CO₂ de la caldera. Aquest càlcul es fa amb la següent equació:

$$Emisió\ de\ CO_2 = 2.03 \left(\frac{kg\ de\ CO_2}{Nm^3} \right) \cdot Consum\ GN \left(\frac{Nm^3}{h} \right)$$

Equació 11.10.2

$$Emisió\ de\ CO_2 = 2.03 \left(\frac{kg\ de\ CO_2}{Nm^3} \right) \cdot 158.7 \left(\frac{Nm^3}{h} \right) = 322.16\ kg\ de\ CO_2/h$$

Taula 11.10.2: Resultats calderes

Caldera	Consum gas natural ($\frac{Nm^3}{h}$)	Emssió de CO ₂ (kg/h)
CO-701	157.27	322.16
CO-702	84	170.54

11.10.2. Càlcul consum d'aigua

En aquest apartat es calcula el cabal d'aigua de la planta que s'ha d'afegir per les pèrdues de caudal d'aigua causades per la pèrdua d'aigua en la torre de refrigeració i el cabal d'aigua que entra en la columna d'absorció.

Es sap que cada 10°C salt tèrmic en una torre de refrigeració es perd un dos per cent del cabal que travessa la torre. Sabent que, el nostre salt tèrmic és de 65°C a 30°C, es un set per cent del cabal introduït a la torre de refrigeració.

$$Q_{reposició} = 155 \frac{m^3}{h} \cdot 0.07 = 10.85 \frac{m^3}{h}$$

EL formaldehid es comercialitza dissolt en aigua osmotitzada, a continuació és calcula el cabal d'aigua necessària sabent que l'equip escollit te un tasa de recuperació d'aigua entre el 50-70% [8], s'assoleix un valor de tasa del 50% per ser més conservadors.

$$Q_{osmotitzada} = \frac{9850 \frac{kg}{h}}{0.5} = 19700 \frac{kg}{h} \text{ de xarxa}$$

El consum d'aigua de la planta serà de 30.61 m³/h

11.10.3. Consum elèctric dels chillers.

Els calor que dissipen els cillers difereix de la potència elèctrica necessària per aquest bescanvi de calor per tant es procedeix al càlcul de les necessitats elèctriques de cada chiller.

Taula 11.10.3. Calor dissipada per cada equip

Caldera	Calor bescanviat (kW)	Cabal aigua glicolada (kg/h)
CH-701	225	32500
CH-702	225	32500

La potència elèctrica és pot calcular amb la següent equació:

$$P_{elèctrica}(kW) = \frac{Q (kW)}{COP}$$

On:

- $P_{elèctrica}$: és la potència elèctrica consuida en kW

- Q : és el calor bescanviat per cada equip en kW
- COP : relació entre capacitat de refrerament i potència elèctrica consumida en aquest cas 5 segons fabricant.

Per el càlcul s'agafa d'exemple el chiller CH-701:

$$P_{elèctrica}(kW) = \frac{225 (kW)}{5} = 112.5 kW$$

Taula 11.10.4: Resultats chillers

Caldera	Calor bescanviat (kW)	Potència elèctrica consumida (kW)
CH-701	225	112.5
CH-702	225	112.5

11.11. Consum elèctric i dimensionament del transformador

Sabent que el consum total de tots els equips de planta es de 4839 kW, es calcula la potència aparent necessària en la planta, per això s'ha d'aplicar un factor de potència, es suposarà un valor del 80%.

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

On:

- S =potència aparent (kVA)
- P =potència consumida per els equips (kW)
- f = factor de potència

$$S = \frac{4839 kW}{0.8} = 6048.75 kVA$$

Per tant, es seleccionaran dos transformadors de 5000 kVA, els quals cobreixen les necessitats estimades, assegurant una operació segura i estable.

11.12. Referencies

- [1] Deshmukh, S. A. R. K., van Sint Annaland, M., & Kuipers, J. A. M. (2005). Kinetics of the partial oxidation of methanol over a Fe-Mo catalyst. *Applied Catalysis A: General*, 289(2), 240–255. <https://doi.org/10.1016/j.apcata.2005.05.005>
- [2] 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>
- [3] Perry, R. H., & Green, D. W. (Eds.). (2001). *Perry's chemical engineers' handbook* (7.^a ed.). McGraw-Hill.
- [4] Sinnott, R. K., & Towler, G. P. (2020). *Chemical engineering design* (6.^a ed.). Butterworth-Heinemann.
- [5] Treybal, R. E. (1980). *Mass-transfer operations* (3.^a ed.). McGraw-Hill
- [6] StaMixCo. (s. f.). *X-Grid static mixer (Type GX) for viscous material processing*. Recuperado el 17 de maig de 2026, de <https://www.stamixco-usa.com/x-grid>
- [7] Reuss, G., Disteldorf, W., Gamer, A. O., & Hilt, A. (2012). Formaldehyde. En *Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry* (Vol. 15, p. 735). Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. https://www.ugr.es/~tep028/pqi/descargas/Industria%20quimica%20organica/tema_1/documentos_adicionales/a11_619_formaldehido.pdf
- [8] ZONESUN. (s. f.). *ZS-RO10T industrial reverse osmosis water treatment equipment*. <https://www.zonesun.com/es/products/zonesun-zs-ro10t-industrial-reverse-osmosis-water-treatment-equipment?variant=56234225959078>
- [9] Europer. (s. f.). *Ficha técnica: Acero inoxidable 316–316L* [Ficha técnica]. <https://europer.cl/wp-content/uploads/2022/04/FICHAS-TECNICA-ACERO-INOX.316-316L.pdf>
- [10] American Society of Mechanical Engineers. (2023). ASME BPVC 2023, Section VIII, Division 1: Rules for Construction of Pressure Vessels. <https://dl.gasplus.ir/standard-ha/Standard-ASME/ASME%20BPVC%202023%20Section%20VIII%20div.%201.pdf>
- [11] Universitat Autònoma de Barcelona. (s. f.). *Absorció* [Material docente]. https://e-aules.uab.cat/2024-25/pluginfile.php/546197/mod_resource/content/0/6_Absorci%C3%B3.pdf

- [12] Paul, E. L., Atiemo-Obeng, V. A., & Kresta, S. M. (2004). Handbook of Industrial Mixing: Science and Practice. Wiley-Interscience.
- [13] Silver Chem. (s. f.). *FeMo catalyst, Formox process producing formaldehyde by methanol oxidation*. Silver Chem. <https://silver-chem.co/index.php/product/femo-catalyst-formox-process-producing-formaldehyde-by-methanol-oxidation/>
- [14] Morancais, P., Hirech, K., Carnelle, G., & Legrand, J. (1999). Friction factor in static mixer and determination of geometric parameters of SMX Sulzer mixers. *Chemical Engineering Communications*, 171(1), 77-93.
- [15] National Institute of Standards and Technology. (s.f.). *NIST Chemistry WebBook, SRD 69*. U.S. Department of Commerce. <https://webbook.nist.gov>
- [16] Liang, W., Li, Y., Zheng, C., Ma, X., Li, J., & He, H. (2016). Reverse-flow reactor in removal of lean carbon monoxide. *Journal of Beijing University of Technology*, 42*(9), 1428-1434.
- [17] Emerson Process Management Regulator Technologies LLC. (2022, 28 d'octubre). *CRN 0C04927.25R3* [Registre de disseny/Certificat de registre]. https://www.documentation.emersonprocess.com/intradoc-cgi/idc.cgi?isapi.dll?IdcService=GET_FILE&dID=8684007&dDocName=CRN_0C04927.25&allowInterrupt=1
- [18] Cryospain. (2022, 26 de agosto). *ASME B31: diseño, materiales, fabricación, pruebas e inspección de tuberías a presión*. <https://cryospain.com/es/asme-b31-diseno-materiales-fabricacion-pruebas-inspeccion-tuberias-presion>
- [19] Cruz Fierro, C. F. (s. d.). *Diagrama de Moody* [Arxiu PDF]. Recuperat el 9 de juny de 2026, de <https://cruzfierro.com/formularios/moody.pdf>
- [20] FeMo Catalyst, Formox process producing formaldehyde by methanol oxidation - silver-chem.co. (2024, 15 gener). Recuperat el 20 d'abril de 2026 de silver-chem.co. <https://silver-chem.co/index.php/product/femo-catalyst-formox-process-producing-formaldehyde-by-methanol-oxidation/>

11.13. Annex

```
function Reactor_tfg_Isoterm
clear all
close all
%1. CONDICIONS D'ENTRADA (mol/s)
Fae = 43.8;
FH2Oe = 0;
F02e = (Fae/0.1-Fae)*0.21; % Excés oxigen
FN2e = (Fae/0.1-Fae)*0.79;
FTe = Fae + FH2Oe + F02e + FN2e;
% Fraccions molars d'entrada
yMetOHe = Fae/FTe;
yO2e = F02e/FTe;
yN2e = FN2e/FTe;
%% 2. PROPIETATS DEL REACTOR I CATALITZADOR
T_op = 300 + 273.15; % Temperatura d'operació (K)
P_op = 2; % Pressió d'operació (atm)
rho_llit = 900; % Densitat del llit (kg/m³)
O = 0.4; % Porositat del llit
visc = 2.5e-5; % Viscositat del gas (Pa·s)
rhoc = rho_llit / (1 - O); % kg/m³
Dp = 0.005; % Diàmetre de partícula (m)
R= 8.314; % J/(mol·K)
eps=0.5*yMetOHe;

%% 3. DILUCIÓ DEL CATALITZADOR (evita punts calents)
dilucio_0 = 0.2; % Fracció activa al inici
dilucio_f= 0.4; % Fracció activa al final (98% conversió)
%el catalitzador es mescla amb catalitzador inert
%% 4. Caracterisítiques dels tub i carcassa
Dt_ext = 0.033; % m canonada 1" i ¼ Dexterior

Dt_int=0.033-2*0.00165; %gruix equivalent a un bwg 16
Dc = 2.5 ; % m
Area_carcasa = pi()/4 * Dc^2;
Area_tub = pi()/4 * Dt_ext^2;

Ntubs_suposicio = ceil(Area_carcasa * 0.8 / Area_tub);
A=Area_carcasa*0.8
%% 5. Integració
% Integració ODE amb event de conversió 98%

opts = odeset('Events', @parada_fa, 'RelTol', 1e-6, 'AbsTol', 1e-9);
[W, X] = ode45(@reactor, [0 4500], [Fae F02e FH2Oe 0 0 2 T_op], opts);

%% 7.Càlculs finals
conversio_X = (Fae - X(end,1)) / Fae;
```

```

Wcat_tub = (pi()/4 * Dt_int^2 * 1.5) * rho_llit;
Wcat_total = W(end);
Ntubs_bo = Wcat_total / Wcat_tub;
Volum_total = (pi()/4 * Dt_int^2 * 1.5) * Ntubs_bo;
Mols_metOh_end=X(end,1);
AP=X(1,6)-X(end,6);
% Mostrar resultats

fprintf('\nGrau de conversió al reactor: %.2f%%\n', conversio_X*100);

fprintf('Massa de catalitzador per tub: %.2f kg/tub\n', Wcat_tub);

fprintf('Nombre de tubs suposats: %.0f tubs\n', Ntubs_suposicio);

fprintf('Nombre de tubs necessaris: %.0f tubs\n', Ntubs_bo);

fprintf('Massa de catalitzador total: %.2f kg\n', Wcat_total);

fprintf('Mols de metanol final: %.2f mols/s\n', Mols_metOh_end);

fprintf('Volum total reactor: %.2f m³\n', Volum_total);

fprintf('Caiguda pressió: %.2f atm\n', AP);
function dfadw = reactor(W, F)
FMetOh = F(1);

FO2 = F(2);
FH2O = F(3);
FHCHO = F(4);
FCO = F(5);
P = F(6);
T=F(7);
% Flux total
FT = FMetOh + FH2O + FO2 + FHCHO + FCO + FN2e;
conversion_actual = (Fae - FMetOh) / Fae;

% Evita divisió por cero si conversión_final no es exactamente 0.98
conv_target = 0.98;
if conversion_actual >= conv_target
dilucio = dilucio_f;
else

dilucio = dilucio_0 + (dilucio_f - dilucio_0) * conversion_actual / conv_target;

end
% Fraccions molars
yMetOH = FMetOh/FT;
yO2 = FO2/FT;
yH2O = FH2O/FT;
yHCHO = FHCHO/FT;
yCO = FCO/FT;
% Pressions parcials

```

```

PmetOH = P * yMetOH;
PO2 = P * yO2;
PH2O = P * yH2O;
PHCHO = P * yHCHO;
PCO = P * yCO;
% Paràmetres cinètics (T_op consistent)
R = 8.314; % J/(mol·K)
KMetOH = 2.6e-4 * exp(56780/(R*T)); % atm-1
KH2O = 5.5e-7 * exp(86450/(R*T)); % atm-1
KO2 = 1.423e-5 * exp(60320/(R*T)); % atm-0.5

kMetOH_HCHO = 1.5e7 * exp(-86000/(R*T)); % mol/(kg·s)
kCO = 3.5e2 * exp(-46000/(R*T)); % mol/(kg·s)
%Densitats d'entrada
P1=P*101325;
rhoMetOH= 0.032*P1/(R*T); %densitat metanol
rhoH2O=0.018*P1/(R*T); %densitat aigua
rhoO2=0.032*P1/(R*T); %densitat O2
rhoN2=0.028*P1/(R*T); %densitat N2
%Cabals màssics (kg/s)
m_metOH=FMetOH*0.032;
m_H2O=FH2O*0.018;
m_O2=FO2*0.032;
m_N2=FN2e*0.028;
m_HCHO=FHCHO*0.03;
m_CO=FCO*0.028;
mt=m_metOH+m_O2+m_N2+m_H2O+m_HCHO+m_CO;
%calcul d'alfa i beta equació d'ergun
G= mt/A; %kg/s*m2

PM_mezcla = (yMetOHe*32 + yO2e*32 + yN2e*28) / 1000; % kg/mol
rho_gas = (2 * 101325) * PM_mezcla / (R * T);
beta = (G / (rho_gas * Dp)) * (((1-O)/O^3) * (((150*(1-O)*visc)/Dp) + 1.75*G));
alfa=2*beta/(A*rhoc*(1-O)^2*101325);
% Cinètica

teta_metOH = (KMetOH * PmetOH) / (1 + KMetOH*PmetOH + KH2O*PH2O);
teta_O2 = (KO2 * sqrt(PO2)) / (1 + KO2*sqrt(PO2));
teta_formol = PHCHO / (1 + KMetOH*PmetOH + KH2O*PH2O);
rate1 = kMetOH_HCHO * teta_metOH * teta_O2 * dilucio;
rate2 = kCO * teta_formol * teta_O2 * dilucio;

% Equacions diferencials
dfadw = zeros(7,1);
dfadw(1) = -rate1; % MetOH
dfadw(2) = -0.5*rate1 - 0.5*rate2; % O2

```

```
dfadw(3) = rate1 + rate2; % H2O
dfadw(4) = rate1 - rate2; % HCHO
dfadw(5) = rate2; % CO

dfadw(6) = -((beta/(A*rho_llit))*((2)/(P))*(FT/FTe))/101325;
dfadw(7)=0; %reactor isotherm
end

function [val, isterminal, direction] = parada_fa(~, F)
val = F(1) - Fae*(1 - 0.98); % Aturar al 98% conversió
isterminal = 1;
direction = 0; % Detecta qualsevol direcció
end
end
```