

PLANTA DE PRODUCCIÓ DE FORMALDEHID

PROJECTE FI DE GRAU

Enginyeria Química

Juny 2026



Cesc Anguera Llàcer, Isis Blanco Casahuga, Matilde Granwehr de Sousa,
Oriol Fortuny Gómez, Jose Ignacio Esquivel Silva

TUTOR: Antoni Sánchez Ferrer

PLANTA DE PRODUCCIÓ DE FORMALDEHID

PROJECTE FI DE GRAU

Enginyeria Química

Juny 2026

CAPÍTOL 11: MANUAL DE CÀLCULS



Cesc Anguera Llàcer, Isis Blanco Casahuga, Matilde Granwehr de Sousa,
Oriol Fortuny Gómez, Jose Ignacio Esquivel Silva

TUTOR: Antoni Sánchez Ferrer

TAULA DE CONTINGUTS

11.1 INTRODUCCIÓ	1
11.2 DISSENY DELS TANCS D'EMMAGATZEMATGE	1
11.2.1 TANCS DE METANOL	1
11.2.2 TANCS DE FORMOL	3
11.3 DISSENY DE LES CUBETES DE RETENCIÓ	4
11.3.1 CUBETA DELS TANCS DE METANOL	4
11.3.2 CUBETA DELS TANCS DE FORMOL	5
11.4 DISSENY DELS MESCLADORS	5
11.4.1 MESCLADOR ESTÀTIC (ME-201)	5
11.4.2 MESCLADOR ESTÀTIC (ME-401)	8
11.5 DISSENY DEL REACTOR MULTITUBULAR.....	8
11.5.1 INTRODUCCIÓ	8
11.5.2 MODEL CINÈTIC	9
11.5.3 CARACTERÍSTIQUES FÍSQUES DEL CATALITZADOR.....	10
11.5.4 EQUACIÓ DE DISSENY	10
11.5.5 ESTEQUIOMETRIA	11
11.5.6 CAIGUDA DE PRESSIÓ AL LLIT EMPACAT	12
11.5.7 CONDICIONS D'OPERACIÓ	13
11.5.8 DIMENSIONAMENT	13
11.5.9 CÀLCUL DEL N° DE TUBS	14
11.5. 10 VOLUM, LONGITUD I DIÀMETRE DE LA CARCASSA	15
11.6 DISSENY DE LES COLUMNES D'ABSORCIÓ	20
11.6.1 COLUMNA D'ABSORCIÓ (CA-401)	20
11.6.2 COLUMNA D'ABSORCIÓ (CA-402)	21
11.7 DISSENY DELS BESCANVIADORS DE CALOR	22
11.7.1 DISSENY EXEMPLE BESCANVIADOR DE CALOR E-201	22
11.8 EQUIP CATOX.....	28
11.9 CANONADES, BOMBES I COMPRESSORS	28
11.9.1 CÀLCUL DELS PARÀMETRES DE LES CANONADES	28
11.9.2 CÀLCUL DELS PARÀMETRES DE LES BOMBES	30
11.9.3 CÀLCUL DELS PARÀMETRES DELS COMPRESSORS	35
11.10 DISSENY DE LA BASSA D'AIGUA	35
11.10.1 IDENTIFICACIÓ DELS SISTEMES ACTIUS I CABALS DE DISSENY	35
11.10.2 DIMENSIONAMENT GEOMÈTRIC	37
11.11 DISSENY DEL SISTEMA DE BOMBAMENT	37
11.11.1 DIMENSIONAMENT DE LA BOMBA PRINCIPAL.....	38
11.11.2 DIMENSIONAMENT DE LA BOMBA JOCKEY	39

11.12 SERVEIS	40
11.12.1 TANC DE NITROGEN	40
11.12.2 CALDERA	40
11.12.3 TORRE DE REFRIGERACIÓ.....	42
11.12.4 SISTEMA DE GENERACIÓ D'AIRE COMPRIMIT	42
11.12.5 TRANSFORMADOR ELÈCTRIC.....	43

11.1 Introducció

El present capítol recull de manera sistemàtica totes les metodologies i procediments de disseny seguits per al disseny dels equips que formen la planta de producció de formalina. L'objectiu d'aquest document és proporcionar una base tècnica rigorosa que justifiqui les decisions de disseny adoptades al llarg del projecte, de manera que qualsevol resultat obtingut pugui ser reproduït i verificat de forma independent.

Per a cada equip s'ha seguit una estructura de càlcul que comprèn la definició de les condicions d'operació i les especificacions de disseny, l'aplicació de la metodologia de càlcul corresponent amb les hipòtesis adoptades, i la presentació dels resultats al dimensionament definitiu de l'equip.

Les metodologies emprades combinen mètodes analítics clàssics de l'enginyeria química amb l'ús de programari de simulació (programa Aspen HYSYS) i el respectiu càlcul, havent-se verificat en tot moment la coherència dels resultats amb els balanços de matèria i energia del procés. Totes les expressions, correlacions i normes tècniques utilitzades han estat degudament referenciades al llarg del document.

11.2 Disseny dels tancs d'emmagatzematge

11.2.1 Tancs de metanol

Partint del cabal de procés de 6,964 m³/h:

- Volum útil total (V_n):

$$V_n = 8,61 \text{ m}^3/\text{h} \cdot 24 \text{ h/dia} \cdot 7 \text{ dies} = 1446,4 \text{ m}^3$$

- Volum útil per tanc (4 unitats):

$$V_{u, \text{tanc}} = 361,6 \text{ m}^3/\text{tanc}.$$

- Volum de disseny (factor 1, 1):

$$V_{\text{total}} = 361,6 \cdot 1,1 = 397,7 \text{ m}^3$$

S'utilitzen 4 tancs degut a que la cubeta ha de poder contenir el 100% del volum del tanc més gran. Tancs més grans requeririen més espai de planta.

Dimensions del tanc:

- Diàmetre (D): 7,5 m
- Alçada (H): 9 m
- Relació H/D : = 1,2
- Capacitat final real: $3,1416 \cdot \left(\frac{D}{2}\right)^2 \cdot H = 397,62$

Una vegada s'obtenen les dimensions del tanc es pot calcular tant el gruix com el pes d'aquest.

$$t_d = \frac{4,9 \cdot D \cdot (H-0,3) \cdot G}{S_d \cdot E} + CA \quad (1)$$

On:

- t_d : amplada de disseny de la virola (mm)
- D: diàmetre del tanc (m)
- H: alçada del tanc (m)
- G: densitat relativa
- S_d : tensió admissible (N/mm^2)
- E: factor de soldadura
- CA: tolerància a la corrosió (mm)

$$t_d = \frac{4,9 \cdot 7,5 \cdot (9 - 0,3) \cdot 0,792}{160 \cdot 1,0} + 1,5 = 1,58 \text{ mm} + 1,5 \text{ mm} = 3,08 \text{ mm}$$

- Gruix adoptat (Virola): 6 mm (mantenim un gruix estructural de seguretat per sobre del mínim teòric).
- Gruix adoptat (Capçal el·lipsoidal): 5 mm . ep
- Gruix adoptat (Fons): 6 mm.

Amb els gruixos es poden calcular el pesos de cada part del tanc (virola, capçal i fons):

- Pes de la Virola (P_{Virola})

$$Àrea = \pi \cdot D \cdot H = \pi \cdot 7,5 \text{ m} \cdot 9 \text{ m} = 212,06 \text{ m}^2$$

$$P_{Virola} = A \cdot t_d \cdot \rho_{acer} = 212,06 \text{ m}^2 \cdot 0,006 \text{ m} \cdot \frac{7.850 \text{ kg}}{\text{m}^3} = 9.987,9 \text{ kg}$$

- Pes del Capçal El·lipsoidal ($P_{capçal}$)

$$D_{pla} = 1,1 \cdot 7,5 + 2 \cdot 5 = 8,35 \text{ m}$$

$$P_{capçal} = A \cdot t_h \cdot \rho_{acer} = \left(\frac{\pi \cdot 8,35^2}{4} \right) \cdot 0,005 \text{ m} \cdot 7.850 \text{ kg/m}^3 = 2.149,3 \text{ kg}$$

- Pes del Fons (P_{fons})

$$P_{fons} = A \cdot t_d \cdot \rho_{acer} = \frac{\pi \cdot 7,5^2}{4} \text{ m}^2 \cdot 0,006 \text{ m} \cdot 7.850 \text{ kg/m}^3 = 2.080,8 \text{ kg}$$

Un cop s'han calculat els pesos per separats, es calculen els següents pesos per acabar de definir els pes del tanc definitiu (P_{op}).

$$P_{estructural} [kg] = P_{virola} + P_{capçal} + P_{fons} \quad (2)$$

$$P_{buit} [kg] = P_{estructural} * f \quad (3)$$

On:

f : factor per soldadures i accessos (1,05)

$$P_{op} [kg] = P_{buit} * (V_{u, tanc} * \rho_{fluid}) \quad (4)$$

On:

$\rho_{metanol}$ = densitat del fluid que va dins del tanc (kg/m³)

Taula 11.1: Pes tanc de metanol

Estat de Càrrega	Càlcul (kg)	Pes Final (Tn)
Pes Estructural	9.987,9 + 2.149,3 + 2.080,8	14,22
Pes Tanc Buit (P_{buit})	14,22 · 1,05 (factor per soldadures i accessos)	14,93
Pes Operació (P_{op})	$P_{buit} + (361,6 \cdot 792)$	301,3

11.2.2 Tancs de formol

Partint del cabal de procés de 14,97 m³/h i del disseny de fer un tanc de producció de formol al dia:

- Volum útil total per tanc (V_n):

$$V_n = \frac{14,97 \text{ m}^3}{\text{h}} \cdot \frac{24 \text{ h}}{\text{dia}} \cdot 5 \frac{\text{dies}}{2 \text{ tancs}} = 898,2 \text{ m}^3$$

- Volum de disseny (factor 1,1):

$$V_{total} = 898,2 \cdot 1,1 = 988,02 \text{ m}^3$$

S'utilitzen 7 tancs, com que la cubeta ha de poder contenir el 100% del volum del tanc més gran. Tancs més grans requeririen més espai de planta, tot i ser menys tancs. Cal tenir en compte que es recomana una mesura màxima d'1,5 metres d'alçada de cubeta. A més cal poder fer proves de qualitat al producte, si està emmagatzemat el producte de cinc dies en un mateix tanc i no passa els criteris d'acceptació s'hauria de llençar molta producció.

Dimensions del tanc:

- Diàmetre (D): 10 m

- Alçada (H): 13 m
- Capacitat final real: 1021,02 m³

Es segueixen les mateixes formules utilitzades per calcular els tancs de metanol a l'apartat anterior.

El gruix mínim calculat per aquests tancs es el següent:

$$t_d = \frac{4,9 \cdot 10 \cdot (13 - 0,3) \cdot 1,08}{160 \cdot 0,85} + 0 = 4,94 \text{ mm}$$

A partir d'aquestes dades s'utilitzen les equacions 2,3 i 4 per calcular els pesos i s'obtenen les següents dades:

Taula 11.2: Pes tanc de formol

Estat de Càrrega	Càlcul (kg)	Pes Final (Tn)
Pes Estructural	19.603,6 + 13.854,5 + 3.769,92	37,3
Pes Tanc Buit (P_{buit})	37,3 · 1,05 (factor per soldadures i accessos)	39,1
Pes Operació (P_{op})	$P_{\text{buit}} + (898,2 \cdot 1100)$	1027,1

11.3 Disseny de les cubetes de retenció

11.3.1 Cubeta dels tancs de metanol

Per tal de dissenyar la cubeta amb la capacitat necessària i sota normativa s'han seguit els següents passos:

1. Volum necessari: $V_{\text{cubeta}} = 361,6 \text{ m}^3$.
2. Alçada del mur: $H_{\text{mur}} = 1,5 \text{ m}$ (màxim recomanat per normativa)
3. Superfície neta: $\frac{361,6}{1,5} \text{ m}^2 = 241,1 \text{ m}^2$
4. Superfície ocupada pels altres tancs: $\pi \cdot 3,75^2 \cdot 3 = 132,54 \text{ m}^2$
5. Superfície mínima total: $241,1 \text{ m}^2 + 132,54 \text{ m}^2 = 373,6 \text{ m}^2$
6. Amplada necessària tenint en compte distància entre tancs: amb 7,5 metres de diàmetre contant una formació de 2x2 --> 15 metres d'amplada dels tancs.
7. Segons normativa APQ1 (el marc normatiu utilitzat en aquest càlcul es troba al capítol 5 "seguretat i higiene"): ½ dels diàmetres dels recipients de distància entre tancs (mínim 3,75) i 5 metres de distància fins al mur de la cubeta.
8. Amplada total de la cubeta sumant passos 6 i 7 = 29 metres d'amplada mínima.
9. Proposta de mesures de la cubeta 29x29 metres = 841 m² totals de superfície.
10. Amb aquesta nova superfície només calen 0,53 metres d'alçada de cubeta.

11.3.2 Cubeta dels tancs de formol

Per tal de dissenyar la cubeta amb la capacitat necessària i sota normativa s'han seguit els següents passos:

1. Volum necessari: $V_{\text{cubeta}} = 898,2 \text{ m}^3$.
2. Alçada del mur: $H_{\text{mur}} = 1,5 \text{ m}$ (màxim recomanat per normativa)
3. Superfície neta: $\frac{898,2}{1,5} \text{ m}^2 = 598,8 \text{ m}^2$
4. Superfície ocupada pels altres tancs: $\pi \cdot 5^2 \cdot 1 = 78,54 \text{ m}^2$
5. Superfície mínima total: $78,54 \text{ m}^2 + 598,8 \text{ m}^2 = 677,34 \text{ m}^2$
6. Amplada necessària tenint en compte distància entre tancs: situació més crítica, amb 10 metres de diàmetre--> 20 metres d'amplada.
7. Segons normativa APQ1 (el marc normatiu utilitzat en aquest càlcul es troba al capítol 5 "seguretat i higiene"): $\frac{1}{2}$ dels diàmetres dels recipients de distància entre tancs (mínim 5).
8. S'usen 7 metres de distància entre tancs per complir amb la superfície mínima de la cubeta + 5 metres de distància fins al mur de la cubeta.
9. Amplada total de la cubeta sumant els passos 6 i 8 = 37m d'amplada mínima.
10. Proposta de mesures de cubeta 37x20 metres, que dona un total de 740 m².
11. Amb la superfície final de cubeta, l'alçada d'aquesta ha de mesurar 1,35 m.

11.4 Disseny dels mescladors

11.4.1 Mesclador estàtic (ME-201)

L'equip ME-201 és un mesclador estàtic en línia la funció del qual és homogeneïtzar el corrent d'aire de procés amb el metanol gasós prèviament vaporitzat. Aquest procediment de càlcul detalla la metodologia de dimensionament per establir la geometria de l'equip, garantint que la concentració de metanol es mantingui en tot moment per sota del límit d'inflamabilitat (inferior al 6,5 % molar) abans d'entrar al reactor.

Extracció de propietats termodinàmiques i de flux:

Per a un dimensionament rigorós, els valors de les propietats termodinàmiques no s'estimen manualment, sinó que s'extreuen directament del paquet de fluids resolt a la simulació del procés amb Aspen HYSYS. Del balanç de matèria de la mescla resultant (Corrent 7), s'obtenen els següents paràmetres operatius a 226,22 °C i 225kPa:

- Cabal màssic (W): 77.228,68kg/h
- Densitat del gas(ρ): 1,575kg/m³
- Viscositat de la mescla (μ): $2,4 \cdot 10^{-5} \text{ Pa} \cdot \text{s}$

Càlcul del cabal volumètric i l'àrea de pas teòrica

A partir de la densitat i el cabal màssic procedents de la simulació, es determina el cabal volumètric real (Q_s) a les condicions d'operació:

$$Q_s = \frac{W}{\rho \cdot 3600} = 13,62 m^3/s \quad (5)$$

On:

- Q_s és el cabal volumètric a les condicions d'operació [m^3/s]
- W és el cabal màssic total de la mescla gasosa [kg/h]
- ρ és la densitat de la mescla de gasos [kg/m^3]
- 3600 és el factor de conversió per passar d'hores a segons [s/h]

Per al transport i la mescla de gasos a nivell industrial, es recomana operar en un rang de velocitats d'entre 15 i 25 m/s. Prenent una velocitat de disseny intermèdia de 20 m/s es calcula l'àrea teòrica necessària:

$$A_{calc} = \frac{Q_s}{v_{disseny}} = \frac{13,62}{20} = 0,681 m^2 \quad (6)$$

On:

- A_{calc} és l'àrea de pas teòrica requerida a l'interior de la canonada [m^2].
- Q_s és el cabal volumètric de disseny [m^3/s].
- $v_{disseny}$ és la velocitat de disseny recomanada per al gas [m/s].

Això resulta en un diàmetre teòric:

$$D_{calc} = \sqrt{\frac{4 \cdot A_{calc}}{\pi}} = \sqrt{\frac{4 \cdot 0,681}{\pi}} = 0,931 m \rightarrow 931 mm \quad (7)$$

On:

- D_{calc} és el diàmetre teòric intern requerit per a l'equip [m].
- A_{calc} és l'àrea de pas teòrica [m^2].

Selecció del diàmetre comercial i comprovació de velocitat

En el disseny d'equips en línia i canonades, per evitar el subdimensionament i minimitzar la caiguda de pressió s'ha d'optar sempre pel diàmetre comercial estandarditzat immediatament superior. S'escull, per tant, un diàmetre nominal DN1000 ($D = 1,000 m$). L'àrea de pas real passa a ser de $0,785 m^2$.

Amb això, es torna a calcular la velocitat real a l'interior de l'equip:

$$v_{real} = \frac{Q_s}{A_{real}} = \frac{13,62}{0,785} = 17,35 m/s \quad (8)$$

On:

- v_{real} és la velocitat real d'operació del gas dins l'equip comercial [m/s]
- Q_s és el cabal volumètric de disseny [m³/s].
- A_{real} és l'àrea de pas interna del diàmetre comercial seleccionat (DN1000) [m²]

Aquesta velocitat real es troba plenament dins el rang òptim 15-25m/s, validant la selecció geomètrica sense sobredimensionar en excés la instal·lació.

Comprovació hidrodinàmica (Nombre de Reynolds)

S'ha de garantir que el règim de circulació sigui altament turbulent per permetre l'homogeneïtzació correcta mitjançant els elements estàtics interns. Es calcula el nombre de Reynolds (Re):

$$Re = \frac{\rho \cdot v_{real} \cdot D}{\mu} = \frac{1,575 \cdot 17,35 \cdot 1}{2,4 \cdot 10^{-5}} = 1.138.593 \text{ (9)}$$

Com que $Re \gg 4.000$ es confirma un flux àmpliament turbulent.

Dimensionament dels elements interns i longitud total

Per a l'interior del mesclador, s'ha seleccionat una geometria de plaques corrugades creuades (tipus Sulzer SMV), ja que és la configuració més òptima per afavorir el contacte íntim de gasos en règim altament turbulent.

D'acord amb els criteris de disseny d'aquest fabricant, l'espai que ocupa cada element barrejador és directament proporcional al diàmetre nominal de la canonada on s'instal·la (és a dir, tenen una ràtio longitud/diàmetre d'1:1). Com que prèviament s'ha definit un diàmetre intern d'1 metre (DN1000), cada placa mescladora tindrà una longitud exactament d'1 metre.

Finalment, per garantir que el grau d'homogeneïtzació és total i assegurar que cap volum aïllat de gas assoleixi una concentració de metanol superior al límit d'inflamabilitat del 6,5 %, la literatura tècnica i les taules del fabricant recomanen utilitzar 6 elements mescladors consecutius. D'aquesta manera, multiplicant la longitud geomètrica d'un únic element (1 metre) pel nombre d'elements requerits (6 unitats), s'estableix que la carcassa del mesclador estàtic ME-201 tindrà una longitud total de 6 metres.

Estimació de la pèrdua de càrrega

Per validar l'eficiència energètica, es calcula la caiguda de pressió de l'equip. Per a un disseny tipus Sulzer SMV, el factor de resistència és de $K=5$ per cada element intern.

Primer es calcula la pressió dinàmica del gas a l'interior del tub:

$$P_{din} = \frac{1}{2} \cdot \rho \cdot v_{real}^2 = \frac{1}{2} \cdot 1,575 \cdot 17,35^2 = 237 \text{ Pa (10)}$$

Com que l'equip disposa de 6 elements, la pèrdua de càrrega total és:

$$\Delta P = (6 \text{ elements} \cdot 5) \cdot P_{din} = 30 \cdot 237 = 7,11 \text{ kPa (11)}$$

Aquest valor (0,07 bar) és excel·lent i totalment assumible per al procés. Confirma que el diàmetre DN1000 és l'òptim, ja que evita caigudes de pressió que penalitzarien el compressor abans del reactor catalític.

11.4.2 Mesclador estàtic (ME-401)

L'equip ME-401 homogeneïtza el corrent líquid de formalina al 37% abans del seu emmagatzematge. El procediment de càlcul és anàleg al descrit per al mesclador ME-201, adaptant els criteris hidrodinàmics per a fluids incompressibles.

A partir del balanç de matèria extret de la simulació (Corrent 17 a 51,52 °C i 150,0 kPa, amb una densitat de 1.047 kg/m³ i una viscositat estimada de 0,0008 Pa·s), s'observa un cabal d'operació de 39.591 kg/h. Fixant una velocitat de disseny de 2,00 m/s recomanada per al transport de líquids, s'obté un diàmetre de pas teòric de 81,7 mm. Per optimitzar el fluid i evitar pèrdues de càrrega, s'escull el diàmetre comercial DN80 (0,080 m), el qual garanteix una velocitat real de 2,09 m/s dins d'un règim de flux completament turbulent.

Geometria interna i longitud: Per minimitzar la pèrdua de pressió, s'opta per un disseny intern tipus helicoidal (Kenics/PMS). Segons el fabricant, l'alçada de cada element és 1,5 vegades el diàmetre intern de la canonada (0,120 m). Per assegurar una mescla radial perfecta, s'instal·len 6 elements consecutius, donant com a resultat una longitud total de carcassa de 0,72 m.

Estimació de la pèrdua de càrrega: Per validar la viabilitat d'aquest disseny i assegurar que no afectarà negativament les bombes d'impulsió posteriors, s'ha estimat la caiguda de pressió de l'equip. A partir de la pressió dinàmica del fluid (calculada mitjançant la seva densitat i la velocitat real de pas) i aplicant un factor de resistència característic d'aquestes pales torsionades en règim turbulent (que és d'aproximadament 1 per cada element intern, sumant un factor global de 6), s'obté una pèrdua de càrrega total de tan sols 13,7 kPa (uns 0,14 bars). Aquest valor es considera negligible en les línies d'emmagatzematge de producte líquid i confirma que l'elecció del diàmetre DN80 és l'òptima per aconseguir una mescla perfecta sense penalitzar el consum energètic de la planta.

11.5 Disseny del reactor multitubular

11.5.1 Introducció

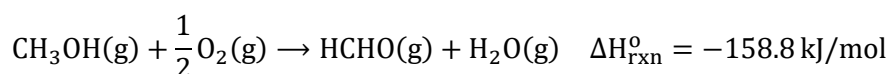
Per al disseny del reactor de la planta MethaForm, s'ha considerat un model matemàtic basat en la cinètica de la llei de potència (model d'Ullmann) per a la reacció principal, donant suport teòric amb dades experimentals i cinètiques pròpies de Deshmukh et al.

En termes generals, aquest reactor (R-301) s'aproxima al comportament d'un Reactor Catalític de Flux Pistó (RCFP). Constructivament, és molt similar a un intercanviador de calor de carcassa i tubs, on la mescla gasosa reactiva circula per l'interior dels tubs empacats amb catalitzador. Atès que la reacció de formació de formaldehid és fortament exotèrmica, per la carcassa de l'equip hi circula un fluid de refredament (Dowtherm A) per garantir l'estabilitat tèrmica.

Es faran els càlculs necessaris per calcular el volum del reactor, la massa necessària de catalitzador i els diferents paràmetres seleccionats, com pot ser les característiques del llit empacat. En primer lloc, s'exposarà el model cinètic que s'utilitzarà, les equacions de disseny del reactor i totes les equacions auxiliars necessàries per realitzar la resolució, i seguidament es calcularà la massa de catalitzador, volum.

11.5.2 Model cinètic

La reacció química principal en el procés FORMOX és l'oxidació parcial del metanol per formar formaldehid i vapor d'aigua com a subproducte. Tot i que en el procés industrial poden donar-se reaccions secundàries (com l'oxidació a monòxid de carboni o la formació de dimetil èter), el catalitzador seleccionat ofereix una selectivitat extremadament alta, i això permet centrar el disseny en la reacció principal:



Segons la literatura (model d'Ullmann), l'equació de velocitat per a aquesta reacció segueix un model de llei de potència inhibida per la presència de vapor d'aigua.

$$r = k \cdot P_{\text{CH}_3\text{OH}}^{0.94} \cdot P_{\text{O}_2}^{0.10} \cdot P_{\text{H}_2\text{O}}^{-0.45} \quad (12)$$

Equació (12): Llei de velocitat de reacció de potència

La dependència de la constant cinètica respecte a la temperatura es regeix per l'equació d'Arrhenius:

$$k = A \cdot \exp(-E_a/RT) \quad (13)$$

Equació (13): Equació d'Arrhenius

On els paràmetres de disseny emprats es resumeixen a la següent taula:

$P_{\text{CH}_3\text{OH}}^{0.94}$ =pressió parcial metanol (Pa)

$P_{\text{O}_2}^{0.10}$ =pressió parcial oxigen (Pa)

$P_{\text{H}_2\text{O}}^{-0.45}$ =pressió parcial aigua (Pa)

Taula 11.3: Paràmetres cinètics i termodinàmics de la reacció principal

Paràmetres	Simbol	Valor	Unitats
Velocitat de la reacció	r		$(\text{mol} \cdot \text{kg}_{\text{cat}}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$
Constant Cinètica	k		$(\text{mol} \cdot \text{kg}_{\text{cat}}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-0,59})$
Factor Pre-exponencial	A	$1,35 \cdot 10^7$	$(\text{mol} \cdot \text{kg}_{\text{cat}}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-0,59})$
Energia d'activació	E_a	98.000	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$
Constant dels gasos	R	8,314	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
Calor de reacció	ΔH_{rxn}^0	-158.800	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$

11.5.3 Característiques físiques del catalitzador

El procés FORMOX utilitza un catalitzador comercial d'òxids mixts de ferro i molibdè. Concretament, s'ha seleccionat el model comercial **MOC5** fabricat per Alder S.p.A.. Per optimitzar la hidrodinàmica i reduir la caiguda de pressió al llarg del tub, aquest catalitzador es presenta amb una geometria d'anells foradats (*tabletted rings*).

Taula 11.4: Característiques físiques del catalitzador MOC5

Propietat	Especificació tècnica
Composició activa	Òxid de Ferro-Molibdè (Fe-Mo)
Geometria del catalitzador	Anells cilíndrics foradats (tabletted rings)
Diàmetre de partícula (D_p)	5,0 mm (Aprox. diàmetre exterior)
Porositat del llit (θ)	0,40 (Fracció de buit)
Densitat aparent del llit (ρ_B)	750 kg/m ³ (Bulk density)
Font: Fitxa tècnica Alder S.p.A	

11.5.4 Equació de disseny

L'equació de disseny d'un reactor catalític multitubular prové del balanç de matèria diferencial aplicat al sistema al llarg de la coordenada de reacció, realitzant el balanç de matèria aplicat al sistema i considerant els fenòmens de transferència de massa, calor, i la cinètica de reacció. Aquest tipus de reactor està compost per nombrosos tubs amb catalitzador, amb un fluid de refredament que circula a l'exterior per controlar la temperatura. Per tant, el funcionament és similar al d'un RCFP.

El balanç de matèria del reactor per a un component clau A és el següent:

$$E - S + G = A$$

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

En estat estacionari, assumint flux pistó (sense dispersió radial), el balanç de matèria per al reactiu limitant (Metanol, "A") es defineix respecte a la massa de catalitzador (W):

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

Dividint entre ΔW i quan aquest tendeix a zero:

$$\frac{dF_A}{dW} = -r_A' \quad (14)$$

Equació (14): Balanç de matèria diferencial (en base a la massa)

Si expressem aquesta equació de disseny en base a la conversió obtenim:

$$\frac{dX}{dW} = \frac{-r_A}{F_{Ae}} \quad (15)$$

Equació (15): Equació de disseny del reactor (en base a la conversió)

On $F_{A,e}$ és el cabal molar d'entrada del component clau [mol/s] i W és la massa de catalitzador [kg].

Les taxes netes de variació molar per a cada component individual al llarg del llit s'expressen enllaçant la velocitat de la reacció principal (r_1) amb el seu respectiu coeficient estequiomètric:

Equació (16): Balanç pel Metanol: $\frac{dF_m}{dW} = -r_1 \quad (16)$

Equació (17): Balanç pel Formaldehid: $\frac{dF_f}{dW} = r_1 \quad (17)$

Equació (18): Balanç per l'Oxigen: $\frac{dF_o}{dW} = -0.5r_1 \quad (18)$

Equació (19): Balanç per l'Aigua $\frac{dF_w}{dW} = r_1 \quad (19)$

Equació (20): Balanç pels Inerts $\frac{dF_n}{dW} = 0 \quad (20)$

11.5.5 Estequiometria

Com que la reacció té lloc amb components en fase gas, les concentracions dels components a l'entrada i durant la reacció ve donada per les equacions següents:

$$C_{ie} = P e * \frac{y_{ie}}{R * T_e} \quad (21)$$

Equació (21): Concentració total inicial del gas

$$y_{i,e} = \frac{C_{ie}}{C_{Total}} = \frac{F_{ie}}{F_{Total}} \quad (22)$$

Equació (22): Fracció molar inicial

La concentració molar de qualsevol espècie (i) en qualsevol punt del reactor, en funció de la conversió (X), la pressió (P) i la temperatura (T), queda definida per:

$$C_i = C_{Ae} * \left(\frac{\theta_i - \frac{v_i}{v_A} X}{1 - \varepsilon \cdot X} \right) * \left(\frac{P}{P_e} \right) * \left(\frac{T_e}{T} \right) \quad (23)$$

Equació (23): Concentració en funció de la conversió i expansió

On $\theta_i = \frac{F_{i,e}}{F_{A,e}}$ és la relació d'alimentació, i $\varepsilon = y_{Ae} \cdot \sum \frac{v_i}{v_A}$ és el factor d'expansió del gas.

11.5.6 Caiguda de pressió al llit empaquetat

Tal com s'observa en l'equació (23) hi ha una dependència directa del valor de la pressió de la reacció, aquesta és una variable que va descendant al llarg del reactor. Aquesta pèrdua de pressió es pot aproximar mitjançant l'equació de pèrdua de pressió d'Ergun ja que aquesta equació expressa la pèrdua de pressió a través d'un llit empaquetat porós:

$$\frac{dP}{dz} = \frac{-G}{\rho \cdot g_c \cdot D_p} \cdot \frac{1-\theta}{\theta^3} \cdot \left(\frac{150 \cdot (1-\theta) \cdot \mu}{D_p} + 1,75 \cdot G \right) \quad (24)$$

Equació (24): Equació diferencial d'Ergun

On z és la longitud del tub [m], G és la densitat de flux màssic [$\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$], i μ és la viscositat del gas [$\text{Pa} \cdot \text{s}$].

Relacionant la coordenada espacial (z) amb la massa de catalitzador acumulada (W) mitjançant la densitat aparent i l'àrea transversal (A_c): Relació massa-longitud

$$W = (1 - \theta) \cdot A_c \cdot z \cdot \rho_c \quad (25)$$

Equació (25): Equació diferencial d'Ergun

Combinant ambdues expressions s'obté la caiguda de pressió referenciada a la massa de catalitzador integrada al model:

$$\frac{dP}{dW} = -\frac{\alpha}{2} \cdot \left(\frac{P_e^2}{P} \right) \cdot \left(\frac{T}{T_e} \right) \cdot (1 - \varepsilon \cdot X) \quad (26)$$

Equació (26): Caiguda de pressió màssica acoblada

Es definiran dues variables, β i α , ja que diversos paràmetres depenen únicament de les propietats del llit i de les condicions d'entrada:

Equació (27): Paràmetre de fricció (β_0):

$$\beta_0 = \frac{G}{\rho \cdot g_c \cdot D_p} \cdot \frac{1-\theta}{\theta^3} \cdot \left(\frac{150 \cdot (1-\theta) \cdot \mu}{D_p} + 1,75 \cdot G \right)$$

Equació (28): Paràmetre global de pèrdua (α):

$$\alpha = \frac{2 \cdot \beta_0}{A_c \cdot \rho_b \cdot P_e}$$

11.5.7 Condicions d'Operació

L'alimentació cap al reactor es realitza mitjançant el **Corrent 7**, les característiques termodinàmiques i massiques del qual s'han obtingut mitjançant simulació.

Taula 11. 5: Especificacions d'entrada al reactor (Corrent 7)

Paràmetre d'Entrada	Valor	Unitats
Temperatura (T_e)	226,2	C° (499,35 K)
Pressió d'operació (P_e)	225,0	kPa
Cabal molar total (F_{Total})	2.657,76	kmol/h (738,27 mol/s)
Cabal màssic total ($\dot{m}_{gas}$)	77.228,68	kg/h (21,452 kg/s)
Fracció molar Metanol (y_{CH_3OH})	0,0649	Adimensional
Fracció molar Oxigen (y_{O_2})	0,1964	Adimensional
Fracció molar Nitrogen (y_{N_2})	0,7387	Adimensional
Font: Simulació del Corrent 7		

11.5.8 Dimensionament

El procés FORMOX utilitza un catalitzador comercial d'òxids mixts de ferro i molibdè (MOC5). A diferència dels models clàssics esfèrics, l'optimització hidrodinàmica de la planta exigeix l'ús de geometria en forma d'anells (*tabletted rings*) per augmentar la porositat del llit i reduir la pèrdua de càrrega.

El punt crític per al disseny i dimensionament mecànic del reactor R-301 és la velocitat lineal superficial del gas a l'interior dels tubs. En processos catalítics de fase gas altament exotèrmics, aquest paràmetre ha d'estar estrictament acotat entre 1,0 m/s i 3,0 m/s

- Una velocitat inferior a 1,0 m/s no generaria prou turbulència, reduint dràsticament el coeficient de transferència de calor convectiu cap a la paret del tub i provocant un sobreescalfament perillós (*runaway*).
- Una velocitat per sobre dels 3,0 – 4,0 m/s generaria una fricció excessiva contra les pastilles de catalitzador, provocant pèrdues de càrrega inassolible i el risc de fractura mecànica del llit.

Per garantir una evacuació tèrmica òptima sense penalitzar l'energia d'impulsió, s'estableix una velocitat lineal objectiu de disseny a l'entrada del reactor de $v_{obj} = 2,69 \text{ m/s}$ (situada a la franja superior d'eficiència). A partir d'aquesta premissa, el dimensionament geomètric de l'equip es dedueix de la següent manera:

Coneixent el cabal màssic total a processar ($\dot{m}_{gas} = 21,45 \text{ kg/s}$) i els fluxos molars de la Corrent 7, es determina el pes molecular mitjà de la mescla:

$$PM_{mix} = \frac{\dot{m}_{gas}}{F_{total}} = \frac{21.451 \text{ g/s}}{47,92 + 145,01 + 545,40 \text{ mol/s}} = \frac{21.451}{738,33} = (0,02905 \text{ kg/mol})$$

Assumint un comportament de gas ideal a les condicions d'operació a l'entrada ($P_0 = 226.100 \text{ Pa}$ i $T_0 = 491,25 \text{ K}$), la densitat del gas resulta:

$$\rho_0 = \frac{P_0 \cdot PM_{mix}}{R \cdot T_0} = \frac{225.000 \text{ Pa} \cdot 0,02905 \text{ kg/mol}}{8,314 \text{ J/(mol} \cdot \text{K)} \cdot 491,25 \text{ K}} = 1,575 \text{ kg/m}^3$$

Això ens permet conèixer el cabal volumètric real (Q_0) que penetra al reactor:

$$Q_0 = \frac{\dot{m}_{gas}}{\rho_0} = \frac{21,45 \text{ kg/s}}{1,575 \text{ kg/m}^3} = 13,62 \text{ m}^3/\text{s}$$

Nota: Aquest corrent coincideix força amb el valor de cabal volumètric que ens dona el HYSYS, al corrent 7: $49040 \text{ m}^3/\text{h} = 13.62 \text{ m}^3/\text{s}$

Atès que s'ha fixat la velocitat lineal objectiu en $v_{obj} = 2,69 \text{ m/s}$, l'àrea transversal total lliure (A_c) que ha d'oferir el reactor per aconseguir exactament aquesta velocitat és immediata per continuïtat de flux:

$$A_c = \frac{Q_0}{v_{obj}} = \frac{13,62 \text{ m}^3/\text{s}}{2,69 \text{ m/s}} = 5,063 \text{ m}^2$$

11.5.9 Càlcul del N° de tubs

El fabricant del catalitzador imposa l'ús de tubs amb un diàmetre intern màxim de $d_t = 0,021 \text{ m}$ per evitar gradients tèrmics radials dins de la pastilla. L'àrea de pas d'un sol tub és:

$$A_{tub} = \frac{\pi \cdot (d_t)^2}{4} = \frac{\pi \cdot (0,021 \text{ m})^2}{4} = 3,463 \times 10^{-4} \text{ m}^2$$

Aleshores, el nombre de tubs necessaris (n_t) es calcula dividint l'àrea total requerida per l'àrea unitària:

$$n_t = \frac{A_c}{A_{tub}} = \frac{,063 \text{ m}^2}{3,463 \times 10^{-4} \text{ m}^2} = 14.617,7 \text{ tubs}$$

Per a l'estandardització de la matriu del feix tubular, s'arrodoneix i es fixa definitivament un arranjament de 14.600 tubs.

Amb la geometria validada, es comprova el flux màssic superficial de gas operatiu:

$$G = \frac{\dot{m}_{gas}}{A_c} = \frac{21,452 \text{ kg/s}}{5,057 \text{ m}^2} = 4,24 \text{ kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$$

Aquest valor cau perfectament dins de l'interval industrial de disseny per a processos FORMOX (3,0 – 6,0 kg/(m² · s)).

11.5. 10 Volum, Longitud i Diàmetre de la Carcassa

11.5.10.1 Volum del Llit Catalític

Per assolir la conversió objectiu del 92,00% del metanol, el model cinètic resol que cal una massa de catalitzador de $W_{cat} = 7.050 \text{ kg}$. El volum físic ocupat pel llit és:

$$V_{llit} = \frac{W_{cat}}{\rho_B} = \frac{7.050 \text{ kg}}{750 \text{ kg/m}^3} = 9,4 \text{ m}^3$$

(Nota: El codi font en MATLAB emprat per a la integració d'aquest model s'adjunta a l'apartat d'Annexos del projecte).

11.5.10.2 Longitud dels Tubs (L):

Aquest volum de catalitzador s'ha de distribuir uniformement dins de l'àrea transversal dels tubs interns calculada a l'apartat anterior ($A_c = 5,057 \text{ m}^2$). L'alçada necessària dels tubs resulta, per tant, en:

$$L = \frac{V_{llit}}{A_c} = \frac{9,4 \text{ m}^3}{5,057 \text{ m}^2} = 1,86 \text{ m}$$

11.5.10.3 Diàmetre de la Carcassa (D_{shell}):

Els 14.600 tubs es distribueixen en la placa tubular segons un arranjament de pas triangular (triangular pitch). Amb un diàmetre exterior de tub de $d_{ext} = 25 \text{ mm}$ i un pas de $P_T = 1,25$. $d_{ext} = 31,25 \text{ mm}$, el diàmetre de la carcassa es calcula de la següent manera per a feixos grans:

$$D_{\text{shell}} \approx P_T \cdot \sqrt{\frac{n_t}{0,907}} = 0,03125 \cdot \sqrt{\frac{14.600}{0,907}} = 3,96\text{m}$$

El reactor adopta un diàmetre exterior comercial definitiu de 4,00 m.

Taula 11.6: Dimensionament del R-201

DIMENSIONS R-301					
Volum del reactor (l)	Longitud (m)	Diàmetre (m) Carcassa	H/D	Nº tubs interns	Diàmetre tubs intern
10	2 m	4 m	0.5	14.600	21 mm

```
function disseny_R301_DowthermA_Corregit()
%
=====
% DISSENY R-301: 1 REACCIÓ + ERGUN (ANELLS) + REFRIGERACIÓ DOWTHERM A
%
=====

% 1. CONDICIONS D'ENTRADA (HYSYS - Corrent 7)
Fm0 = 738.33 * 0.0649;      % Metanol (mol/s)
Fo0 = 738.33 * 0.1964;      % Oxigen (mol/s)
Fn0 = 738.33 * 0.7387;      % Nitrogen inerts (mol/s)
Fw0 = 1e-3;                % Traça d'aigua

Pe_kPa = 226.1;             % Pressió entrada HYSYS (kPa)
Pe = Pe_kPa / 101.325;      % Pressió (atm)
Te = 220 + 273.15;          % Temperatura entrada gas (K)
Ta_e = 280.0 + 273.15;      % Temperatura entrada Dowtherm A (K)

% 2. GEOMETRIA REVISADA (CATALITZADOR EN FORMA D'ANELLS)
D_tub = 0.021;              % 21 mm
Nt = 14300;                 % Nombre de tubs
Ac = Nt * (pi * D_tub^2 / 4);

% Canvis CRÍTICS per evitar l'ofec (valors industrials per MOC5):
Dp = 0.005;                 % Diàmetre equivalent de l'anell (5 mm)
porositat = 0.40;           % Porositat del llit amb anells buits (50%)
rho_b = 750;                % Densitat aparent (kg/m3)

G_massic = 21.45 / Ac;      % Flux màssic (kg/m2.s)

% 3. RESOLUCIÓ DE LES EDOs
% Vector: [Fm, Ff, Fo, Fw, P, T, Ta]
y0 = [Fm0, 0, Fo0, Fw0, Pe, Te, Ta_e];

options = odeset('RelTol', 1e-6, 'AbsTol', 1e-9, 'Events', @(w,y)
events_reactor(w,y,Fm0));

% Integrem permetent arribar a masses grans sense ofegar-se
[W, Y] = ode15s(@(w,y) odes_formox_complet(w, y, Fn0, G_massic, Dp,
porositat, Ac, rho_b), [0 20000], y0, options);

% 4. RESULTATS
W_final = W(end);
Conv_final = (Fm0 - Y(end,1)) / Fm0 * 100;
Pressio_Sortida = Y(end,5) * 101.325; % kPa
Delta_P = Pe_kPa - Pressio_Sortida;
Temp_Sortida = Y(end,6) - 273.15;
Ta_Sortida = Y(end,7) - 273.15;

fprintf('=====\n');
fprintf('RESULTATS R-301 (ANELLS CATALÍTIC + DOWTHERM A)\n');
fprintf('=====\n');
fprintf('Massa de catalitzador necessària : %.2f kg\n', W_final);
fprintf('Conversió final assolida : %.2f %%\n', Conv_final);
fprintf('Temperatura sortida Gas Procés : %.2f °C\n', Temp_Sortida);
fprintf('Hot Spot (Màxima assolida Gas) : %.2f °C\n', max(Y(:,6)) -
273.15);
fprintf('Temperatura sortida Dowtherm A : %.2f °C\n', Ta_Sortida);
```

```

fprintf('Pressió de sortida del gas      : %.2f kPa\n', Pressio_Sortida);
fprintf('Caiguda de pressió (Delta P)    : %.2f kPa\n', Delta_P);
fprintf('===== \n');

% 5. GRÀFIQUES PER A LA MEMÒRIA
figure('Color', 'w', 'Position', [100, 100, 1000, 400]);

subplot(1,2,1);
plot(W, Y(:,6)-273.15, 'r', 'LineWidth', 2); hold on;
plot(W, Y(:,7)-273.15, 'b--', 'LineWidth', 2);
xlabel('Massa de Catalitzador (kg)'); ylabel('Temperatura (°C)');
title('Perfil Tèrmic del Reactor R-301');
legend('Gas de Procés', 'Dowtherm A', 'Location', 'Best'); grid on;

subplot(1,2,2);
plot(W, Y(:,5)*101.325, 'k', 'LineWidth', 2);
xlabel('Massa de Catalitzador (kg)'); ylabel('Pressió (kPa)');
title('Perfil de Pèrdua de Càrrega (Ergun)'); grid on;
end

function dy = odes_formox_complet(W, y, Fn, G, Dp, porositat, Ac, rho_b)
    Fm = y(1); Ff = y(2); Fo = y(3); Fw = y(4);
    P = y(5); T = y(6); Ta = y(7);

    R_J = 8.314;
    Ft = Fm + Ff + Fo + Fw + Fn;

    Pm = max(P * (Fm/Ft), 0);
    Po = max(P * (Fo/Ft), 0);
    Pw = max(P * (max(Fw, 1e-8)/Ft), 1e-8);

    % CINÈTICA
    r1 = 1.35e7 * exp(-98000/(R_J*T)) * (Pm^0.94) * (Po^0.10) * (Pw^-0.45);

    dy = zeros(7,1);
    dy(1) = -r1;
    dy(2) = r1;
    dy(3) = -0.5 * r1;
    dy(4) = r1;

    % ERGUN
    PM_mix = (Fm*32.04 + Ff*30.03 + Fo*32.00 + Fw*18.02 + Fn*28.01) / Ft /
1000;
    rho_gas = (P * 101325 * PM_mix) / (R_J * T);
    mu = 2.5e-5;

    dP_dz = - (G / (rho_gas * Dp)) * ((1 - porositat) / porositat^3) * ...
        ((150 * (1 - porositat) * mu / Dp) + 1.75 * G);
    dy(5) = (dP_dz / (Ac * rho_b)) / 101325;

    % BALANÇ D'ENERGIA
    U_ef = 190;
    am = 0.1608;
    Cabal_oli = 34.5; % kg/s (Alt cabal perquè actuï de bany tèrmic)
    Cp_oli = 2300; % J/kgK (Dowtherm A)

    Q_gen = r1 * 158800;
    Q_transf = U_ef * am * (T - Ta);

```

```

sum_FiCpi = Fm*55 + Fo*31 + Fn*30 + Ff*45 + Fw*35;

dy(6) = (Q_gen - Q_transf) / sum_FiCpi; % T del gas
dy(7) = Q_transf / (Cabal_oli * Cp_oli); % T del Dowtherm A
end

function [value, isterminal, direction] = events_reactor(W, y, Fm0)
    Conv = (Fm0 - y(1)) / Fm0;
    P = y(5);
    value = [Conv - 0.92; P - 0.5]; % S'atura al 92% o si la pressió cau a 0.5
    atm
    isterminal = [1; 1];
    direction = [1; -1];
end

```

11.6 Disseny de les columnes d'absorció

11.6.1 Columna d'absorció (CA-401)

L'equip CA-401 serà l'encarregat d'absorbir en aigua el formaldehid gasós posterior al reactor. S'ha descartat l'opció d'una columna de plats convencionals i s'ha optat per una columna de rebliment (Mellapak 250 Y).

Aquesta elecció tecnològica respon a una restricció hidrodinàmica clau: la necessitat de minimitzar la pèrdua de pressió. Atès que el corrent gasós travessa tot el sistema, qualsevol resistència obligaria a sobredimensionar els compressors de la planta. El líquid descendent formar una fina pel·lícula sobre la seva superfície metàl·lica corrugada. Això maximitza l'àrea de contacte íntim amb el gas ascendent per afavorir la transferència de matèria, però oferint una resistència aerodinàmica pràcticament nul·la en comparació amb el bombolleig forçat d'una columna de plats.

Càlcul del diàmetre (D)

Determinant el diàmetre, evitem la inundació de l'equip. Amb els valors obtinguts pel HYSYS de l'etapa inferior (etapa 20), on el gas es troba en el punt més calent i la càrrega hidràulica és màxima. A partir dels balanços de matèria, s'estableix un cabal de líquid descendent $L_w = 5.494 \text{ kg/h}$ ($\rho_L = 1.047 \text{ kg/m}^3$) i de gas ascendent $V_w = 77.228 \text{ kg/h}$ ($\rho_V = 1.047 \text{ kg/m}^3$). El valor que s'obté del paràmetre de flux d'Eckert és de:

$$F_L = \frac{L_w}{V_w} \cdot \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L}} = \frac{5.494}{77.228} \cdot \sqrt{\frac{1.45}{1.047}} = 0,0024 \quad (29)$$

Aquest valor de F_L actua com a coordenada horitzontal per entrar a la gràfica de pèrdua de càrrega generalitzada (GPDC). Seguint aquest punt amb la corba superior de la gràfica (corba d'inundació), s'obté el paràmetre de capacitat a l'eix vertical. L'equació que defineix aquest eix incorpora, a més de la velocitat del gas, les densitats d'ambdues fases (ρ_V i ρ_L) la viscositat cinemàtica del líquid absorbent (ν_L) i el factor de rebliment o *packing factor* (F_p). Aquest últim és un paràmetre empíric proporcionat pel fabricant que defineix la resistència hidrodinàmica de l'intern, adoptant un valor d'uns 20 m^{-1} pel rebliment *Mellapak 250Y*.

$$\text{Valor Eix Y} = u_f \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L - \rho_V}} \cdot F^{(0,5 \cdot \nu^{0,05})} \quad (30)$$

Substituint totes aquestes propietats conegudes del sistema i aïllant matemàticament la incògnita d'aquesta relació, s'obté la velocitat d'inundació teòrica (u_f).

Per garantir una operació estable i allunyada del col·lapse hidràulic, es fixa una velocitat d'operació (u_{op}) equivalent al 75% d'aquesta velocitat d'inundació, resultant en una velocitat de gas d'1,9 m/s.

coneguda aquesta velocitat òptima i sabent que el cabal volumètric del gas (Q_V) en aquestes condicions és de $17,16 \text{ m}^3/\text{s}$ l'àrea transversal requerida es calcula directament mitjançant la relació $A = Q_V/u_{op}$ obtenint una àrea de $9,03 \text{ m}^2$.

A partir de l'àrea requerida, s'extreu el diàmetre teòric ($D = \sqrt{4A/\pi} = 3,39m^2$). Per facilitar la construcció i estandarditzar components, s'adopta el diàmetre comercial immediatament superior, el DN3400 (3,40m). Això consolida una àrea real de pas de $9,08 m^2$ i garanteix que les 77 tones/hora de gas puguin ascendir sense arrossegar el líquid cap a la part superior de la carcassa.

Càlcul de l'alçada total (H)

Segons els valors obtinguts a HYSYS, el procés requeriria de 20 etapes teòriques per a poder assolir les composicions. S'ha agafat el reblliment de tipus Mellapack 250Y, el qual té una Alçada Equivalent a un Plat Teòric (HETP) de 0,5 m, per tant s'obté una alçada del llit actiu (Z) de:

$$Z = 20 \text{ etapes} \cdot \frac{0,5m}{\text{etapa}} = 10,0 m \text{ (31)}$$

Per assegurar una bona distribució i que el líquid no llisqui cap a les parets, es divideix el reblliment en dos llits de 5 metres cada un, els quals estan separats per un redistribuïdor intern. Afegint una reserva de 4 m per allotjar el distribuïdor d'aigua al capçal i permetre l'acumulació de formol a la base, l'alçada total de la carcassa s'estableix en 14,0 m.

11.6.2 Columna d'absorció (CA-402)

Per dissenyar l'etapa final on es tracten els gasos d'escapament, s'ha creat una columna anomenada CA-402. Aquesta columna és l'encarregada de tractar tot el cabal que ve de l'etapa anterior. Amb les dades del simulador Aspen HYSYS, podem veure que la columna processa un flux de gas que puja de 76.734,35 kg/h i un flux de líquid que baixa de 5.895,28 kg/h, tot això a les condicions de la part inferior de la columna.

Per calcular les dimensions principals de la columna, hem seguit els mateixos passos que vam fer per calcular les dimensions de la primera columna. En aquest cas, hem triat un tipus de reblliment anomenat Anell Pall metàl·lic de 76 mil·límetres i hem fixat una caiguda de pressió estàndard. Amb les propietats físiques dels fluids i les característiques del reblliment, hem calculat que la superfície necessària és de 6,15 metres quadrats. Això ens porta a triar un diàmetre de 2,80 metres.

Pel que fa a l'alçada de la columna, hem vist que calen 20 etapes teòriques d'equilibri, segons la simulació feta amb Aspen HYSYS. Amb la informació sobre l'alçada dels Anells Pall, hem calculat que l'alçada del reblliment actiu és d'11 metres. Sumant els espais necessaris per distribuir el líquid i els fons de la columna, fets d'acer, l'alçada total de la columna és de 14 metres.

11.7 Disseny dels bescanviadors de calor

El disseny dels bescanviadors de calor, s'ha dut a terme utilitzant el programa Aspen Exchanger Design & Rating (EDR) el qual forma part de les eines del programa Aspen Hysys i permet fer el disseny dels bescanviadors de calor de manera clara, precisa i eficient.

Mentre que el programa HYSYS bàsic només fa un balanç d'energia per quadrar temperatures, l'EDR dimensiona la geometria, el nombre de tubs i l'àrea necessària perquè aquest intercanvi sigui possible físicament a la planta.

S'exposarà el cas de disseny pel bescanviador de calor E-202. Cal remarcar que cada bescanviador té condicions de disseny diferents i s'ha hagut d'especificar variables diferents per a cada un, però s'ha seguit el mateix procediment per a tots ells.

11.7.1 Disseny exemple bescanviador de calor E-201.

Abans que l'EDR calculi una geometria, el bloc de l'intercanviador a l'entorn de simulació principal ha d'estar resolt i sense errors.

Primer es va escollir per on anirà cada fluid, si per carcassa o per tubs, i si hi ha canvi de fase en qualsevol dels dos fluids. Important comentar, que s'ha escollit les condicions dels corrents sabent que no hi haurà canvi de fase en cap punt del bescanviador. Doncs el fluid fred (aire) passa per tubs i el calent (oli) passa per carcassa.

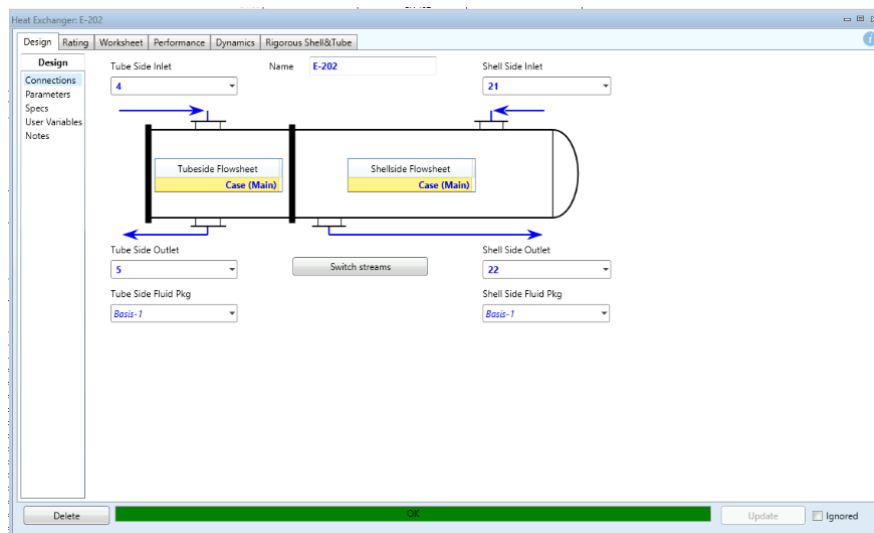


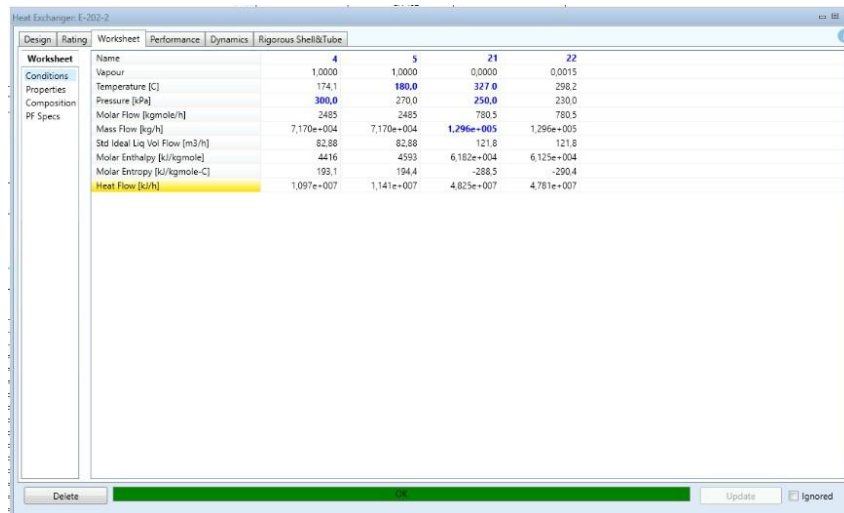
Figura 11.1: Selecció de corrents per tubs i carcassa del bescanviador E-202

Per al cas del bescanviador E-202, on la seva funció és escalfar el corrent d'aire amb el corrent d'oli calent que surt del reactor, s'ha fixat les condicions següents:

1. Pressió de l'aire d'entrada (300 KPa)
2. Temperatura d'entrada de l'oli calent (327 °C)
3. Pressió d'entrada de l'oli calent (250 KPa)

4. Corrent d'entrada de l'oli.
5. Temperatura de sortida de l'aire (aproximadament en el nostre cas 180 °C)

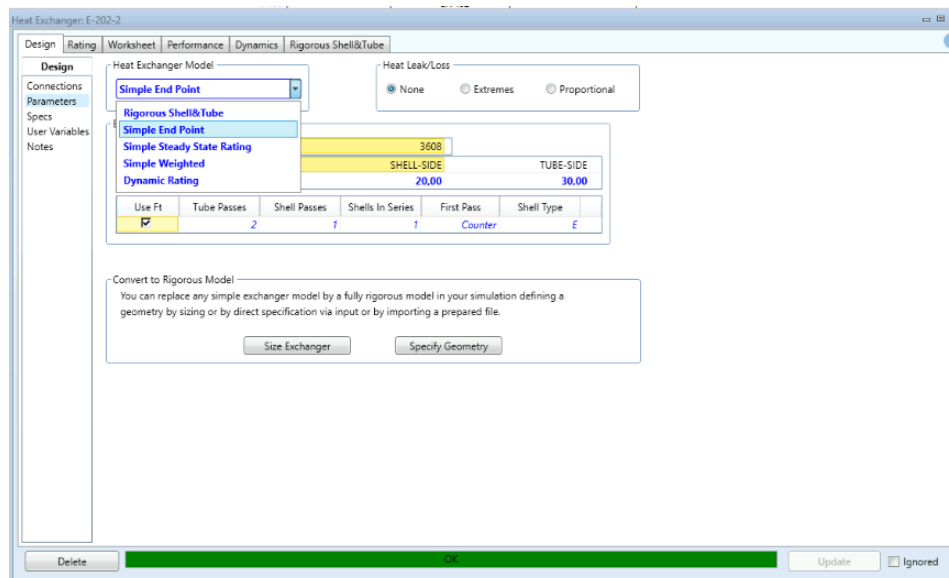
La temperatura de l'aire d'entrada no s'ha fixat perquè venia ja fixada del compressor K-201 igual que el corrent. En el cas de la temperatura de sortida de l'aire, és important fixar-la per permetre que el simulador calculi la calor total transferida sense entrar en bucles d'error, així com la caiguda de pressió pels tubs i carcassa (aquesta caiguda de pressió serà modificada pel programa quan es canvia de mode. Els valors que es posen primer són de referència).



	4	5	21	22
Name				
Vapour	1,0000	1,0000	0,0000	0,0015
Temperature [C]	174,1	180,0	327,0	298,2
Pressure [kPa]	300,0	270,0	250,0	230,0
Molar Flow [kgmole/h]	2485	2485	780,5	780,5
Mass Flow [kg/h]	7,170e+004	7,170e+004	1,296e+005	1,296e+005
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	82,88	82,88	121,8	121,8
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	4416	4593	6,182e+004	6,125e+004
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	193,1	194,4	-288,5	-290,4
Heat Flow [kJ/h]	1,097e+007	1,141e+007	4,825e+007	4,781e+007

Figura 11.2: Paràmetres fixes del bescanviador E-202 abans del Rigorous Mode Sell&Tube

Un cop el balanç tanca en verd, s'activa la pestanya de *Rigorous Shell&Tube*. En aquest moment, es deixa enrere el model ideal i surten tots els errors que l'eina detecta.



Heat Exchanger Model

Heat Leak/Loss: ☒ None ☐ Extremes ☐ Proportional

Simple End Point

Rigorous Shell&Tube

Simple End Point

Simple Steady State Rating: 3608

Simple Weighted: SHELL-SIDE 20,00 TUBE-SIDE 30,00

Dynamic Rating

Use Ft: ☒ Tube Passes: 2 Shell Passes: 1 Shells In Series: 1 First Pass: Counter Shell Type: E

Convert to Rigorous Model

You can replace any simple exchanger model by a fully rigorous model in your simulation defining a geometry by sizing or by direct specification via input or by importing a prepared file.

Size Exchanger Specify Geometry

Figura 11.3: Canvi de mode a Rigorous Shell&Tube

Heat Exchanger Model: **Rigorous Shell&Tube**

Design Conditions

Specified Duty [kJ/h]	<empty>
Inlet Temperature [°C]	300.0
Specified Outlet Temperature [°C]	180.0
Allowable Pressure Drop [kPa]	20.00

Effective Surface Area [m²]: 74.78

Overall Dirty Coeff [kJ/h-m²-C]: 822.1

Vibration Problem: No

Film Coefficient [kJ/h-m²-C]: 5675

Calculated Pressure Drop [kPa]: 11.01

For more details of rigorous model see Rigorous Shell&Tube tab

Temperature Over Specified

Figura 11.4: Error de temperatura sobre especificada pel canvi de mode

Heat Exchanger Model: **Rigorous Shell&Tube**

Worksheet

Name	4-7	5-2	21-2	22-2
Vapour	1.0000	<empty>	0.0000	0.0000
Temperature [°C]	174.1	180.0	300.0	283.7
Pressure [kPa]	300.0	<empty>	250.0	242.2
Molar Flow [kgmole/h]	2485	2485	780.5	780.5
Mass Flow [kg/h]	7.170e+004	7.170e+004	1.296e+005	1.296e+005
Std Ideal Liq Vol Flow [m³/h]	82.88	82.88	121.8	121.8
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	4416	<empty>	6.182e+004	5.619e+004
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	193.1	<empty>	-288.5	-300.9
Heat Flow [kJ/h]	1.097e+007	<empty>	4.825e+007	4.386e+007

Temperature Over Specified

Figura 11.5: Worksheet del bescanviador E-202 abans d'eliminar la temperatura de l'aire

A primera vista, en aquest cas, quan es canvia el mode del bescanviador, el programa detecta que la temperatura ha estat sobre especificada, el que s'ha fet és eliminar la temperatura de l'aire com es veu a la següent imatge.

Name	4-7	5-2	21-2	22-2
Vapour	1,0000	1,0000	0,0000	0,0000
Temperature [C]	174.1	232.5	300.0	283.7
Pressure [kPa]	300.0	225.2	250.0	242.2
Molar Flow [kgmole/h]	2485	2485	780.5	780.5
Mass Flow [kg/h]	7,170e+004	7,170e+004	1,296e+005	1,296e+005
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	82.88	82.88	121.8	121.8
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	4416	6183	6,182e+004	5,619e+004
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	193.1	199.2	-288.5	-300.9
Heat Flow [kJ/h]	1,097e+007	1,536e+007	4,825e+007	4,386e+007

Figura 11.6: Worksheet del bescanviador E-202 després d'eliminar la temperatura de l'aire

Tot i sortir l'avís en verd segons el balanç s'ha tancat, això no garanteix que el resultat sigui correcte. Per obtenir una precisió més elevada en el disseny cal accedir a la pestanya EDR. Un cop dins d'aquesta, a la secció *Errors & Warnings* es pot veure tots els errors que el programa detecta. Per tal de solucionar-los, s'ha seguit el procediment següent:

Primer es desconnecta el bescanviador i un cop desconnectat es posa el mode *Design (Sizing)*.

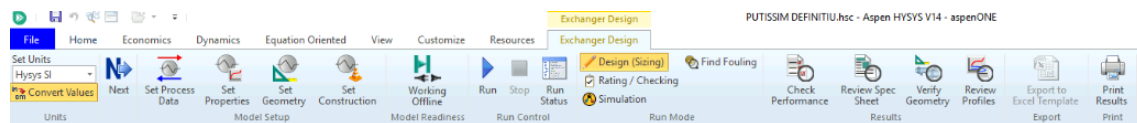


Figura 11.7: Desconnexió del bescanviador i canvi de mode (de Simulation a Design (Sizing))

Amb el mode *Design* ja preparat, s'executa l'opció *Run* moment en què el programa efectua els càlculs interns necessaris per dissenyar les diferents parts de l'equip, com ara la geometria, els tubs i els diàmetres. Quan el programa no aconsegueix seguir i s'atura, a la pestanya *Errors & Warnings* es mostren els errors de disseny que té l'equip. A partir les indicacions que ens diu el mateix programa, es corregeixen un a un.

Un cop resolt els errors, apareixen avisos (*Warnings*), però ja és possible tornar al mode *Simulation* i continuar ajustant l'equip a poc a poc fins a solucionar els problemes.

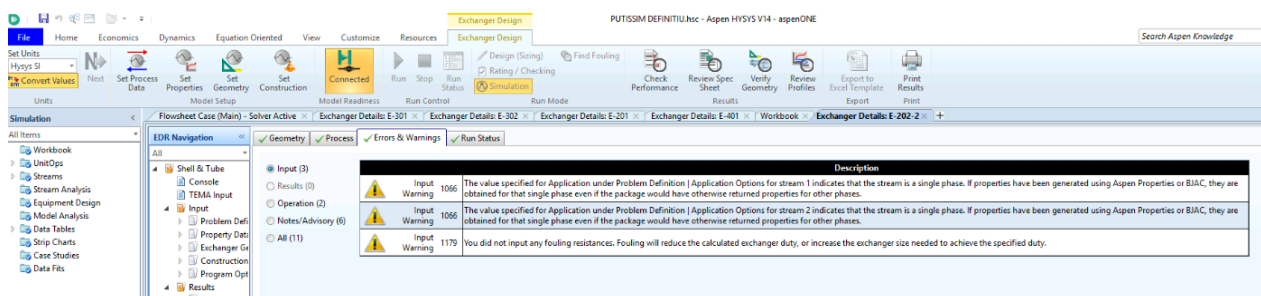


Figura 11.8: Errors de disseny que s'han de solucionar

El programa genera una fitxa tècnica amb tots els paràmetres importants i característics de l'equip, així com imatges de la geometria dels tubs i la seva distribució. A la següent imatge es mostra com són les fitxes tècniques generades pel programa.

1	Size	590,55	X	1600	mm	Type	BEM	Hor	Connected in	1 parallel	1 series
2	Surf/Unit (gross/eff/finned)	44,1	/	41,8	/	m ²	Shells/unit	1			
3	Surf/Shell (gross/eff/finned)	44,1	/	41,8	/	m ²					
4	Simulation	PERFORMANCE OF ONE UNIT									
5											
6	Process Data	Shell Side				Tube Side		Heat Transfer Parameters			
7	Total flow	kg/h	In	Out	In	Out	Total heat load	kW	1219,8		
8	Vapor	kg/h	0	0	71697	71697	Eff. MTD/ 1 pass MTD	°C	86,84	/	86,83
9	Liquid	kg/h	129565	129565	0	0	Actual/Reqd area ratio - fouled/clean	1	/	1	
10	Noncondensable	kg/h	0	0	0	0	Coef./Resist.	W/(m ² ·K)	m ² ·KW	%	
11	Cond./Evap.	kg/h	0	0	0	0	Overall fouled	336	0,00298		
12	Temperature	°C	327	283,73	174,11	232,52	Overall clean	336	0,00298		
13	Bubble Point	°C	302,83	301,09			Tube side film	444,2	0,00225	75,66	
14	Dew Point	°C	302,83	301,09			Tube side fouling	0	0		
15	Vapor mass fraction		0	0	1	1	Tube wall	20332,8	5E-05	1,65	
16	Pressure (abs)	kPa	250	242,247	300	225,177	Outside fouling	0	0		
17	DeltaP allow/cal	kPa	20	7,753	25	74,823	Outside film	1481,1	0,00068	22,69	
18											
19	Liquid Properties					Shell Side Pressure Drop				kPa	%
20	Density	kg/m³	811,71	828,91			Inlet nozzle	1,311	16,58		
21	Viscosity	cp	0,2033	0,2251			InletspaceXflow	1,998	25,27		
22	Specific heat	kJ/(kg·K)	2,114	2,052			Baffle Xflow	1,693	21,4		
23	Therm. cond.	W/(m·K)	0,0875	0,0895			Baffle window	0,546	6,91		
24	Surface tension	dynes/cm					OutletspaceXflow	1,461	18,48		
25	Molecular weight		166	166			Outlet nozzle	0,899	11,36		
26	Vapor Properties					Intermediate nozzles					
27	Density	kg/m³			2,33	1,55	Tube Side Pressure Drop	kPa	%		
28	Viscosity	cp			0,0252	0,0276	Inlet nozzle	9,818	14,8		
29	Specific heat	kJ/(kg·K)			1,042	1,055	Entering tubes	7,097	10,7		
30	Therm. cond.	W/(m·K)			0,036	0,0396	Inside tubes	29,664	44,72		
31	Molecular weight				28,85	28,85	Exiting tubes	14,091	21,24		
32	Two-Phase Properties					Outlet nozzle				5,662	8,54
33	Latent heat	kJ/kg					Intermediate nozzles				
34	Heat Transfer Parameters					Velocity / Rho*V2				m/s	kg/(m·s²)
35	Reynolds No. vapor				146895	134556,5	Shell nozzle inlet	1,37	1532		
36	Reynolds No. liquid	57166,07	51668,78				Shell bundle Xflow	0,75	0,74		
37	Prandtl No. vapor				0,73	0,73	Shell baffle window	0,59	0,58		
38	Prandtl No. liquid	4,91	5,16				Shell nozzle outlet	1,35	1500		
39	Heat Load	kW			kW		Shell nozzle interm				
40	Vapor only	0			1219,8			m/s	kg/(m·s²)		
41	2-Phase vapor	0			0		Tube nozzle inlet	96,19	21534		
42	Latent heat	0			0		Tubes	107,41	161,78		
43	2-Phase liquid	0			0		Tube nozzle outlet	109,23	18461		
44	Liquid only	-1219,8			0		Tube nozzle interm				

Figura 11.9: Fitxa tècnica del bescanviador E-202 generada pel programa

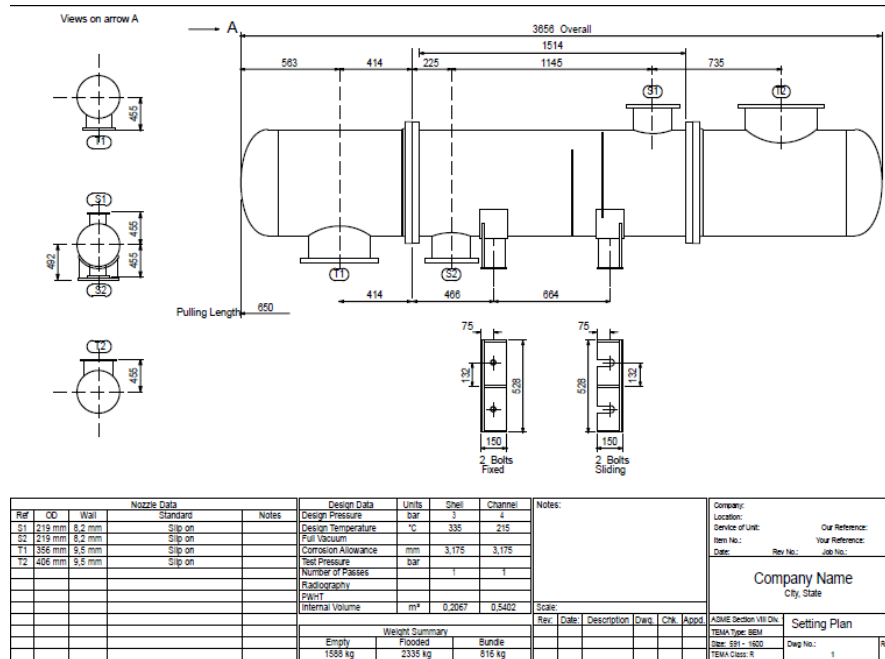


Figura 11.10: Plànol del bescanviador E-202 generat pel programa

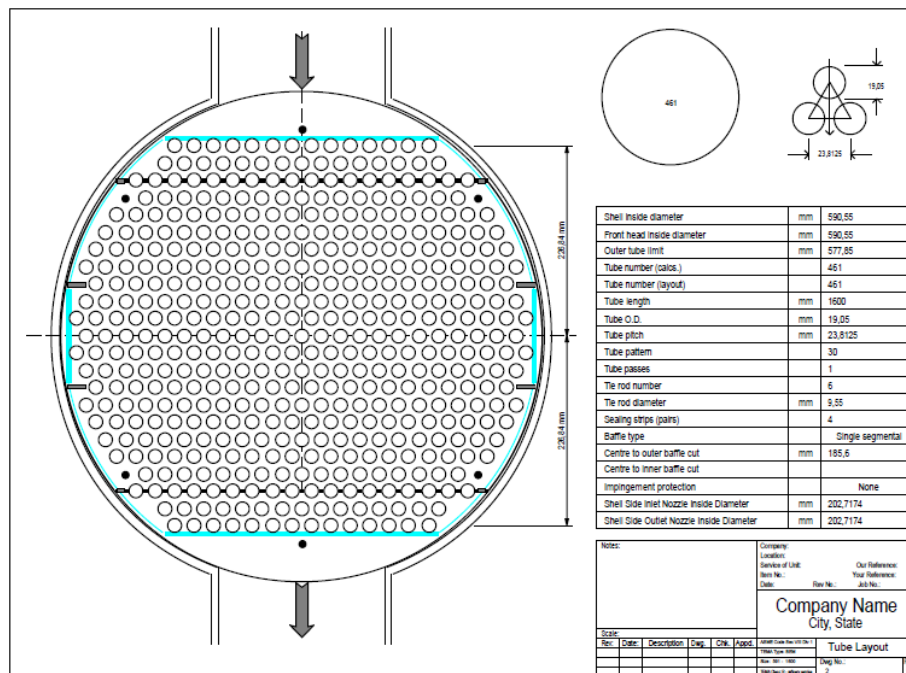


Figura 11.11: Plànol de la geometria dels tubs generada pel programa (bescanviador E-202)

11.8 Equip Catox

Amb el cabal del corrent 18, la temperatura d'operació i pressió d'operació es calcula el cabal en condicions normals:

$$Q_N = Q_{op} \cdot \left(\frac{T_N}{T_{op}} \right) = 73090 \cdot \left(\frac{273,15}{322,05} \right) = 61.992 Nm^3/h (X)$$

Fixant una Velocitat Espacial Horària del Gas estàndard de $15.000h^{-1}$ per a l'eliminació de COVs amb catalitzador de platí/pal·ladi, es determina el volum del llit catalític:

$$V_{cat} = \frac{Q_N}{GHSV} = \frac{61.992}{15000} = 4,13m^3 (32)$$

11.9 Canonades, bombes i compressors

Per tal de calcular la potència necessària de les bombes del procés primerament es necessari determinar els diàmetres, les velocitats de fluid i la llargada de les canonades de la planta.

11.9.1 Càlcul dels paràmetres de les canonades

Per determinar els diàmetres interns de les canonades s'ha utilitzat la següent equació:

$$D = \sqrt{\frac{4Q}{\pi v}} (33)$$

On:

D: diàmetre intern (m)

Q: cabal volumètric (m^3/s)

v: velocitat del fluid (m/s)

En el cas de la canonada DN40-SS2-C1-102, per exemple quedaria substituïda de la següent manera.

$$D = \sqrt{\frac{4 * 8,62(m^3/h) * 1(h)/3600(s)}{\pi * 2(m/s)}} = 0,03904(m) * 1000 = 39,04 mm$$

La velocitat de fluid és una aproximació inicial, s'utilitza 2 m/s pels líquids i 25 m/s pels gasos, la qual cosa bé determinada per la taula 7.

Taula 11.7: Velocitats dels fluids

TIPUS DE FLUID	TRAM DE CIRCULACIÓ	VELOCITAT (m/s)
LIQUIDS NO VISCOSOS	Canonada d'aspiració (abans de la bomba)	0,6-0,9
	Canonada d'impulsió o línia de procés	1,5-2,5
LIQUIDS VISCOSOS	Canonada d'aspiració (abans de la bomba)	0,06-0,25
	Canonada d'impulsió o línia de procés	0,15-0,6
GASOS		9-36
VAPOR		9-23

La mida del diàmetre intern que s'obté amb aquesta fórmula és una guia per escollir el diàmetre nominal i exterior. Una vegada s'obtenen aquests paràmetres es pot calcular el diàmetre intern real de la canonada, el qual determinarà la velocitat de fluid real, tot seguint el procediment descrit a continuació.

Una vegada s'obté el diàmetre intern es busca a taules de Schedule diàmetres nominals que siguin propers al diàmetre intern calculat.

En el cas de la canonada DN40-SS2-C1-102. El DN més proper és de 50 mm. L'amplada de les parets de la canonada s'ha triat tenint en compte que es treballa amb canonades de fins a 1 metre. És per això que els gruixos triats són amb STD, ja que els valors arriben fins a canonades amb diàmetres grans. I són gruixos que no són tan fins per trencar-se en passar grans cabals de fluid ni tan amples perquè sigui inviable econòmicament.

Una vegada s'extreu de les taules de Schedule el DN, el gruix amb STD i el diàmetre extern, pots calcular el diàmetre intern real.

$$D_i = D_o - 2 * \text{gruix} \quad (34)$$

$$D_i = 48,3 - 2 * 3,68 = 40,94 \text{ mm}$$

Una vegada s'obté el diàmetre intern real, es calcula la velocitat del fluid amb l'equació (33) i aïllant la velocitat. Amb els valors de la canonada DN50-SS2-C1-101 aquest seria el resultat:

$$40,94(\text{mm}) * \frac{1(\text{m})}{1000(\text{mm})} = \sqrt{\frac{4 * 8,62(\text{m}^3/\text{h}) * 1(\text{h})/3600(\text{s})}{\pi v}}$$

El resultat d'aquesta equació és la velocitat en m/s, que en aquest cas dona 1,82 m/s, la qual cosa compleix amb les velocitats normals que marca la taula 7 en un tram d'impulsió de la bomba. En cas que no estigués dins del rang que marca la taula, s'agafaria un altre valor de DN i diàmetre extern i es tornaria a calcular la velocitat. Que les velocitats obtingudes estiguin dins de rang és important pel fet que a massa velocitat hi ha moltes vibracions i soroll.

La llargada de les canonades s'ha calculat tenint en compte distàncies de seguretat entre tancs d'emmagatzematge i equips segons el marc normatiu del capítol 5. S'ha buscat superar la distància mínima de seguretat sense excedir la llargada, ja que, en ser d'AISI 316L o 304L, pot augmentar molt la inversió inicial en planta.

Després de determinar totes aquestes dades, ja es poden calcular els paràmetres de les bombes.

11.9.2 Càlcul dels paràmetres de les bombes

Per tal que el disseny de les bombes garanteixi la circulació adequada dels fluids líquids dins de la planta, és necessari conèixer les pèrdues de càrrega que té el fluid associat al sistema. En treballar amb gasos, a la major part de la planta, la pèrdua de càrrega per fregament o accidents serà negligible. Malgrat que es pugui menysprear a la majoria de les canonades, cal tenir en compte els corrents dels tancs d'emmagatzematge cap al procés, ja que tant el metanol com a matèria primera, com el formol com a producte, s'emmagatzemen en estat líquid.

Les pèrdues de càrrega del fluid es calculen amb dues equacions diferents, l'equació 34 i l'equació (37). La primera correspon a les pèrdues per fricció en tram recte i la segona a les pèrdues donades pels accidents.

En ambdues equacions cal tenir en compte tant el tram d'aspiració com el d'impulsió.

$$ev_{recte} = 4f \frac{v^2}{2} * \frac{L}{D} \quad (34)$$

On:

ev_{recte} = Pèrdues per fricció amb la canonada (m^2/s^2 o J/Kg)

f = factor de Darcy, resistència del flux per la canonada

v = velocitat de circulació del fluid (m/s)

L = longitud de la canonada (m)

D = diàmetre intern de la canonada (m)

Per obtenir el valor del factor de Darcy i completar l'equació 34 és necessari calcular el valor del nombre de Reynolds i la rugositat relativa amb les equacions següents:

$$Re = \frac{(\rho \cdot v \cdot D)}{\mu} \quad (35)$$

On:

Re = nombre de Reynolds

ρ = densitat del fluid (kg/m^3)

v = velocitat de circulació del fluid (m/s)

D = diàmetre intern del tram de circulació (m)

 $\mu = \text{viscositat del fluid (kg/m}\cdot\text{s)}$

$$Rugositat\ relativa = \frac{\varepsilon}{D} \quad (36)$$

On:

D: diàmetre intern (mm)

ε : rugositat del material

En cas de treballar sota regim turbulent cal utilitzar l'Abac de Moody per trobar el factor de Darcy a partir de Reynolds i el coeficient de rugositat.

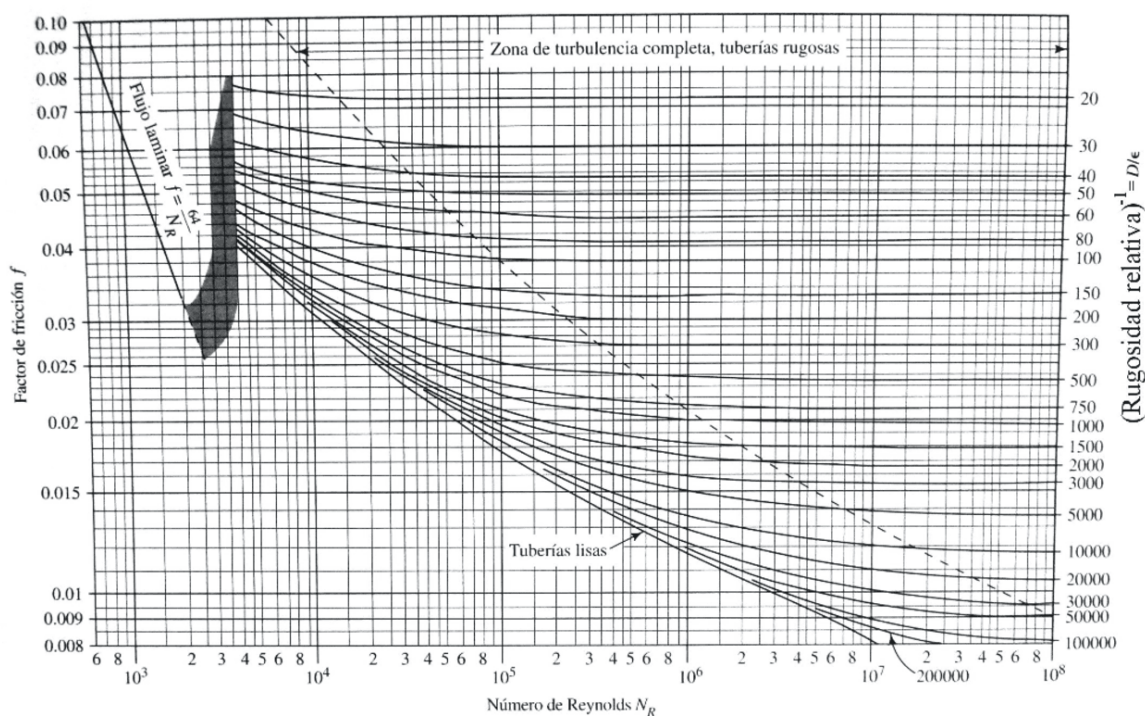


Diagrama de Moody. (Fuente: Pao, R. H. F. 1961. *Fluid Mechanics*. Nueva York: John Wiley e hijos, p. 284.)

Figura 11.12: Diagrama de Moody

En el cas de calcular la pèrdua de càrrega de tram recte de la bomba de metanol primer es calcularia el Reynolds del tram d'aspiració i el d'impulsió.

$$Re_{asp} = \frac{(792 \cdot 1,11 \cdot 0,052)}{5,9 \cdot 10^4} = 7,82 \cdot 10^4$$

$$Re_{imp} = \frac{(792 \cdot 1,82 \cdot 0,0409)}{5,9 \cdot 10^4} = 1 \cdot 10^5$$

$$Rugositat\ relativa\ tram\ aspiració = \frac{0,015}{52,5} = 2,8 \cdot 10^4$$

$$Rugositat\ relativa\ tram\ impulsíó = \frac{0,015}{40,94} = 3,7 \cdot 10^4$$

Amb aquests valors es troben els següents factors de Darcy:

Taula 11.8: Factor de Darcy

	Tram aspiració	Tram impulsíó
4f	0,02	0,02

Per últim, es calcula la pèrdua de càrrega recte dels dos trams.

$$ev_{recte} = 0,02 \frac{1,11^2}{2} * \frac{25}{0,052} = 5,87$$

$$ev_{recte} = 0,02 \frac{1,82^2}{2} * \frac{19}{0,041} = 15,37$$

També és necessari determinar el coeficient de pèrdua de càrrega per accident, que implica la suma de tots els accidents del tram on treballa la bomba.

$$ev_{accidents} = K \cdot \frac{v^2}{2} \quad (37)$$

On:

$ev_{accidents}$ = Pèrdues per fricció degut als accidents (m²/s² o J/Kg)

K = coeficient de pèrdua de l'accident

v = velocitat de circulació del fluid

Els coeficients de pèrdua de càrrega per accident es troben a la figura 12

ACCIDENT	K
Vàlvula de seient	
oberta	9,0
¾ oberta	13,0
½ oberta	36,0
¼ oberta	112,0
Vàlvula angular oberta	2,0
Vàlvula de retenció (oberta)	
de charnera (frontissa)	2,0
de bola	70,0
de disc	10,0
Cabalimètres mecànics	
de disc	7,0
de pistó	15,0
rotatori	10,0
de turbina	6,0
Canvi de diàmetre	
estretament	** (b)
eixamplament	** (b)

* $\left(1 - \frac{D_1^2}{D_2^2}\right)^2$ essent D₁ el diàmetre del tub petit i D₂ el diàmetre del tub gran.

ACCIDENT	K
Entrada/sortida circuit	
Entrada encanxada	0,78
Entrada cantells vius	0,50
Entrada arrodonida	0,04
Sortida encanxada	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

Figura 11.1313: Coeficients de pèrdua de càrrega per accident

En el cas de les pèrdues per accidents de les canonades del tram d'aspiració i impulsió de la bomba de metanol, s'obtenen els següents resultats:

$$ev_{accidents} = 0,17 * 3 + 0,75 * 5 \cdot \frac{1,11^2}{2} = 2,62$$

$$ev_{accidents} = 1 + 3 * 0,75 + 10 + 9 + 0,17 * 3 \cdot \frac{1,82^2}{2} = 37,69$$

Una vegada s'han calculat tots els paràmetres de les equacions anteriors, es poden calcular l'NPSH disponible i la càrrega de la bomba, la qual cosa farà possible el càlcul de la potencia de la bomba.

$$NPSH_{disp} = (z_2 - z_3) + \frac{1}{g} \cdot \left(\frac{P_1 - P_v}{\rho} + \left(\frac{v_1^2}{2\alpha} \right) - ev_{asp} \right) \quad (38)$$

On:

$NPSH_{disp}$ = NPSH disponible de la bomba (m)

$(z_1 - z_3)$ = diferencia d'alçada entre l'inici de la canonada i la bomba (m)

g = valor de la gravetat (m/s^2)

P_v = Pressió de vapor (Pa)

ρ = densitat del fluid (kg/m^3)

v = velocitat del fluid (m/s)

α = factor de correcció de l'energia cinètica, valor aproximat de 1 (adimensional)

ev = pèrdues per fricció en el tram d'aspiració (m^2/s^2)

$$NPSH_d = (0,2 - 0,2) + \frac{1}{9,8} \cdot \left(\frac{101305 - 16900}{792} + \left(\frac{1,11^2}{2 \cdot 1} \right) - 5,87 - 2,62 \right) = 10,1$$

$$h = (z_2 - z_1) + \frac{1}{g} \cdot \left(\frac{P_2 - P_1}{\rho} + \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{v_2^2}{\alpha} - \frac{v_1^2}{\alpha} \right) + ev \right) \quad (39)$$

On:

h = càrrega de la bomba (m)

$(z_2 - z_1)$ = diferencia d'alçada entre el l'inici i el final de la canonada (m)

g = valor de la gravetat (m/s^2)

P = valor de la pressió del fluid (Pa)

ρ = densitat del fluid (kg/m^3)

v = velocitat del fluid (m/s)

α = factor de correcció de l'energia cinètica, valor aproximat de 1 (adimensional)

ev = pèrdues per fricció totals del fluid (m^2/s^2)

$$h = (0,4 - 0,2) + \frac{1}{9,8} \cdot \left(\frac{240000 - 101305}{792} + \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1,82^2}{1} - \frac{1,11^2}{1} \right) + 62,56 \right) = 24,5m$$

Per acabar es calcula la potencia necessària de la bomba.

$$P = Q_m \cdot g \cdot \eta \cdot h \quad (40)$$

On:

P = potència (Watts)

Q : cabal màssic (kg/s)

g: valor de la gravetat (m/s^2)

η : resistència (%)

h. càrrega (m)

$$P = 1,88 * 9,8 * 0,75 * 24,5 = 600$$

Per la bomba de metanol, la potència necessària és de 0,6 kW

11.9.3 Càlcul dels paràmetres dels compressors

En calcular la potència que necessiten els compressors de la planta únicament cal entrar al HYSYS, mirar la potència consumida en kW dels compressors i multiplicar-la per un factor de 1,1 de seguretat. La pantalla que cal mirar és la següent:

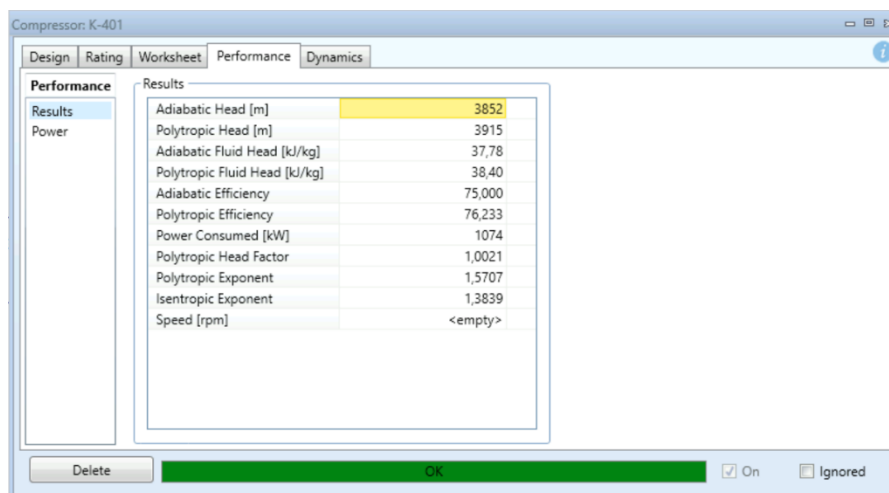


Figura 11.1414: Especificacions del compressor a la pestanya "performance" del HYSYS

En aquest cas, pel compressor K-401, la potència consumida és de 1074 kW, que multiplicada pel factor de seguretat dona $1181,4 \approx 1200 \text{ kW}$.

11.10 Disseny de la bassa d'aigua

El dimensionament de la bassa de reserva d'aigua s'ha realitzat d'acord amb la norma UNE 23500 sobre sistemes d'abastament d'aigua contra incendis, prenent com a punt de partida la identificació dels sistemes fixos d'extinció presents a la planta (els BIEs i els hidrants) i la hipòtesi de funcionament simultani més desfavorable (l'incendi del reactor).

11.10.1 Identificació dels sistemes actius i cabals de disseny

La planta disposa de tres sistemes que utilitzen aigua de la reserva de manera simultània en el pitjor escenari. Els sistemes són els següents:

- 2 Boques d'incendi (BIEs) de 45 mm
- 2 hidrants exteriors DN100

- Sistema de d'aigua polvoritzada del reactor

El cabal d'aigua del sistema s'ha determinat segons la NFPA 15, la qual diu que ha d'haver un cabal mínim de 14,2 L/min/m². Si la superfície de la carcassa del reactor és de 135,18m² doncs trobem el cabal mínim d'aigua que es necessita.

$$Q_{min}[\frac{L}{min}] = Q_{NFPA\ 15}[\frac{L}{min*m^2}] * S_{reactor} [m^2] \quad (41)$$

On:

- Q_{min}: cabal mínim del sistema (l/min)
- Q_{nfpa 15}: cabal mínim segons la norma NFPA 15 (L/min*m²)
- S_{reactor}: superfície del reactor (carcassa) (m²)

$$Q_{min} = 14 \frac{L}{min * m^2} * 135,8 m^2 = 1919,5 \frac{L}{min}$$

Un cop s'ha trobat el cabal, s'ha d'afegir un marge del 15% per seguretat.

$$Q_{min,real} = 1919,5 * 1,15 = 2200 \frac{L}{min}$$

Si tenim un cabal total de 2200 l/min, si volem trobar el cabal per boquet doncs es divideix el cabal total entre el nombre de boquets del sistema.

Per trobar el cabal necessari per les BIEs, segons la norma UNE-EN 671-1, el cabal mínim ha de ser de 160 l/min, doncs es multiplica pel nombre de vies i es troba el cabal total.

$$Q_{BIEs\ total} = 160 \left[\frac{L}{min} \right] * 2 = 320 \left[\frac{L}{min} \right]$$

Per trobar el cabal necessari pels hidrants exterior, segons el reial decret 513/2017, el cabal mínim necessari ha de ser de 500 l/min, doncs es multi pel nombre d'hidrants i es troba el cabal total.

$$Q_{Hidrants\ total} = 500 \left[\frac{L}{min} \right] * 2 = 1000 \left[\frac{L}{min} \right]$$

Un cop calculats els cabals necessaris d'aigua per cada sistema, és multiplica pel rang de temps de funcionament, en el cas de la planta 120min, i es sumen tots tres per així trobar el volum total de la bassa d'aigua.

$$V_{brut} [m^3] = \frac{t_{ús} [min] * (Q_{min,real} + Q_{BIEs\ total} + Q_{Hidrants\ total}) [\frac{L}{min}]}{1000} \quad (42)$$

On:

- V_{brut}: volum brut de la bassa (m³)
- t_{d'ús}: temps estimat del funcionament de la bassa (min)

- Q min,real = cabal necessari del sistema d'aigua polvoritzada pel reactor (l/min)
- Q BIEs total = cabal necessari per les BIEs (l/min)
- Q Hidrants total = cabal necessari pels hidrants (l/min)

$$V_{brut}[m^3] = \frac{120 [min] * (2200 + 320 + 1000) [\frac{L}{min}]}{1000} = 422,4 [m^3]$$

Al volum de la bassa s'ha d'afegir un 5% de volum mort i s'arrodoneix al múltiple de 50 m3 immediatament superior per adoptar un valor comercial.

$$V_{útil} = 422,5 * 1,05 = 443,5 m^3 \rightarrow 450 m^3$$

11.10.2 Dimensionament geomètric

S'ha optat per una bassa rectangular de formigó armat HA-25/B/20/IIa de tipologia semi enterrada, amb les dimensions següents:

$$L * W * H_{útil} = 15 * 10 * 3,5 = 450 m^3 (43)$$

On:

- L: longitud (m)
- W: amplada (m)
- H útil: altura útil de la bassa (m)

El volum geomètric resultant és de 450 m3, doncs les dimensions són correctes.

L'alçada total exterior de la bassa és de 3,5 m, deixant una làmina lliure de 0,3 m per sobre del nivell màxim útil fins al sobreexidor, i reservant 0,5 m de fons com a zona morta per sota del col·lector d'aspiració.

11.11 Disseny del sistema de bombament

El disseny compleix els requeriments d'aspiració i pressurització estipulats per la norma UNE 23500.

- Fluid d'operació: Aigua dolça procedent de la bassa de reserva.
- Temperatura de disseny: 25 °C.
- Pressió requerida a la descàrrega (TDH): 50 m.c.a. (5,0 bar).

Important esmentar que s'ha fet servir una pressió requerida de 5 bar perquè es contenen com a pèrdua de càrrega des de la bassa d'aigua fins a la zona del reactor d'1 bar. Per tant arriba als sistemes a 4 bar.

Per trobar el cabal de disseny, s'ha sumat tots els cabals dels sistemes esmentat a l'apartat **11.9.1 Identificació dels sistemes actius i cabals de disseny**.

$$Q_{diss} \left[\frac{m^3}{h} \right] = \frac{(Q_{min,real} + Q_{BIEs\ total} + Q_{Hidrants\ total}) * 3600}{1000} \quad (44)$$

$$Q_{diss} = \frac{3250 * 60}{1000} = 211 \frac{m^3}{h}$$

11.11.1 Dimensionament de la bomba principal

Dimensionat de les línies d'aspiració i impulsió

Per evitar el fenomen de la cavitació a l'aspiració i reduir les pèrdues de càrrega per fricció, s'estableixen unes velocitats límit recomanades de flux: $v < 1,5$ m/s a l'aspiració i $v < 3$ m/s a la impulsió.

Aplicant l'equació (33) i un cabal de 211 m³/h (0,0586 m/s) s'han adoptat els següents diàmetres comercials estàndards per a instal·lacions contra incendis:

- Línia d'aspiració: velocitat del fluid 1,8 m/s

$$D (m) = \sqrt{\frac{0,0586 * 4}{\pi * 1,8}} = 0,2 m$$

Ens dona un diàmetre de canonada d'aspiració de DN200 (8")

- Línia d'impulsió: velocitat del fluid 3,3 m/s

$$D (m) = \sqrt{\frac{0,0586 * 4}{\pi * 3,3}} = 0,15 m$$

Ens dona un diàmetre de canonada d'aspiració de DN150 (6")

Càlcul de la potència del motor

La potència hidràulica neta (Ph) transmesa al fluid es determina mitjançant l'expressió (45), doncs amb la densitat de l'aigua, la gravetat, el cabal de disseny i la pressió requerida a la descàrrega, trobem la Ph.

$$Ph [W] = \rho \left[\frac{Kg}{m^3} \right] * g \left[\frac{m}{s^2} \right] * Q \left[\frac{m^3}{s} \right] * TDH[m.c.a] \quad (45)$$

On:

- Ph: potència hidràulica (W)
- ρ : densitat de l'aigua (kg/m³)
- G: gravetat (m/s²)
- Q_{diss} : cabal de disseny de la bomba (m³/s)
- TDH: Pressió requerida a la descàrrega (m.c.a)

$$Ph = 1000 * 9,81 * \left(\frac{211}{3600} \right) * 50 = 28179,44 W \rightarrow 28,72 Kw$$

Considerant un rendiment hidràulic estimat de la bomba centrífuga del 75% ($\eta = 0,75$) la potència a l'eix (P_e) requerida és:

$$P_e[Kw] = \frac{P_h}{\eta} \quad (46)$$

On:

- P_h : potència hidràulica (W)
- η : rendiment hidràulic

$$P_e[Kw] = \frac{28,72}{0,75} = 38,29 Kw$$

Per complir amb els marges de seguretat normatius i absorbir possibles sobrecàrregues o desplaçaments en la corba de funcionament, s'aplica un factor de sobredimensionat del 15-20%. Conseqüentment, s'adopta un motor comercial de 46 kW (63 CV).

Verificació a la cavitació

Pel disseny de la bomba, s'ubica la sala de bombes en una cota de -2 m respecte la superfície exterior al mateix nivell que el fons de la bassa.

L'avaluació es realitza per a la condició hidràulica més desfavorable: el moment en què la bassa assoleix el seu nivell mínim útil de reserva (+0,3 m sobre l'eix de la bomba).

L'NPSH disponible (NPSH_d) es calcula com seguint l'equació 38, utilitzada a l'apartat **11.9.2 Càlcul dels paràmetres de les bombes**.

$$NPSH_d = \frac{101325 - 3170}{997 \cdot 9,81} + 0,3 - 0,3 = 10,04 m$$

Com que les bombes comercials de 211 m³/h presenten habitualment un NPSH requerit (NPSH_r) d'entre 3,5 m i 4,5 m, l'ampli marge obtingut (superior a 5 m) garanteix l'absència total de cavitació fins i tot a l'esgotament pràctic de la bassa.

11.11.2 Dimensionament de la bomba Jockey

La bomba Jockey s'encarrega de reposar petites fuites, mantenint la pressió del sistema sense necessitat d'activar la bomba principal.

Paràmetres operatius

El cabal es dimensiona per cobrir aproximadament un 1,5% del cabal principal.

$$Q_j = 211 \cdot 0,015 = 3,16 \frac{m^3}{h}$$

La pressió es defineix d'1,5 bar per sobre de la pressió nominal de la bomba principal per garantir la pressurització contínua i el correcte esglaonament dels pressòstats.

$$TDH_j = 50 + 15 = 65 m.c.a$$

Càlcul de la potència del motor

Utilitzant la mateixa equació de potència hidràulica per a la bomba principal:

$$P_{h,j} = 1000 * 9,8 * \left(\frac{3,16}{3600}\right) * 65 = 559,14 \text{ W} \rightarrow 0,559 \text{ Kw}$$

Com que són bombes petites, el seu rendiment sol ser més baix (entorn del 45-50%), doncs la potència a l'eix (Pe) requerida és:

$$Pe[\text{Kw}] = \frac{0,559}{0,5} = 1,12 \text{ Kw}$$

Doncs aplicant un marge de seguretat del 20%, s'obté un motor elèctric estàndard d'1,35 Kw (2 cv).

11.12 Serveis

A la zona de serveis de la planta és on es troben els equips com el tanc de nitrogen, la caldera, la torre de refrigeració, el generador elèctric i els compressors d'aire.

11.12.1 Tanc de nitrogen

Partint del cabal de procés d'un volum total d'emmagatzematge de 3568 m³ per una autonomia de 7 dies i d'un factor d'expansió del nitrogen líquid de 1:695 a temperatura ambient:

- Volum de nitrogen líquid:

$$V_{N_2} = 3632 \text{ m}^3(\text{gas})/695 = 5,23 \text{ m}^3$$

- Volum de disseny (factor 1,3):

$$V_{\text{total}} = 5,23 \cdot 1,3 = 6,79 \text{ m}^3$$

Dimensions del tanc:

- Diàmetre (*D*): 2,1 m
- Alçada (*H*): 7,17 m
- Capacitat final real: 10 m³

11.12.2 Caldera

Per calcular la potència necessària de la caldera, cal tenir en compte l'energia que s'utilitzarà durant la posada en marxa per escalfar l'oli tèrmic fins a 274°C. Es calcularà a partir d'aquesta energia perquè dels usos que pot tenir la caldera, aquest és el que requereix més energia i es busca dissenyar l'equip perquè funcioni sota les condicions més crítiques.

Per calcular aquesta calor s'ha usat la següent equació:

$$Q_{oli} = m_{oli} * c_{p,oli} * \Delta T \quad (47)$$

On:

Q_{oli} : calor bescanviada [Kj]

m_{oli} : cabal de l'oli tèrmic [kg/h]

$c_{p,oli}$: calor específic de l'oli [kJ/kg*°C]

ΔT : diferència de temperatures [°C]

Per la caldera de la planta s'ha de tenir en compte que no es calcula quan aquesta està en funcionament, sinó per lots. Això és així perquè es busca escalfar l'oli una única vegada, la primera vegada que entra al reactor. Una vegada el procés està en marxa el mateix fluid del reactor escalfarà l'oli de manera independent. Aquest factor influeix en el fet que el cabal màssic a la fórmula se substitueix per la massa de lot d'oli que s'escalfarà.

Primer cal calcular la massa total d'oli que hi ha al circuit tancat, la qual cosa es fa calculant primer el volum total de les canonades i els tubs dels equips per on passa.

$$V = \pi * r^2 * L$$

Amb les canonades d'oli tèrmic aquesta equació substituïda queda així:

$$V = \pi * 0,10135^2 * 21,5 = 0,694 \text{ m}^3$$

A aquest volum cal sumar el volum de tubs dels equips:

$$V_{tot} = 2 + 0,35 + 0,5 + 0,694 = 3,544 \text{ m}^3$$

Al volum cal multiplicar-li la densitat per obtenir la massa total:

$$m = V * \rho \text{ (48)}$$

$$m = 3,544 \text{ m}^3 * 1060 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} = 3.757 \text{ kg}$$

$$Q_{oli} = 3757 * 2,3 * (274 - 25) = 2.151.633,9 \text{ kJ}$$

A partir de l'energia que cal subministrar per escalfar l'oli es pot calcular la potència que es necessita per aconseguir-ho en hora i mitja, que és el temps que s'ha establert.

$$P = \frac{Q_{oli}}{t} \text{ (49)}$$

$$P = \frac{2.151.633,9 \text{ kJ}}{5400\text{s}} = 398,45 \text{ kW}$$

S'aplica un factor de seguretat del 15%:

$$398,45 \text{ kW} * 1,15 = 458,2 \text{ kW}$$

11.12.3 Torre de refrigeració

Per calcular la potència que necessita la torre de refrigeració per refredar l'aigua de 106 °C a 25 °C cal conèixer el cabal d'energia del fluid.

Primerament, cal calcular els paràmetres del cabal unificat, ja que per optimitzar la torre els dos cabals d'aigua que s'usen als bescanviadors s'uneixen per entrar a la torre. Aquest corrent té un cabal màssic de 30.000kg/h, que s'estima sumant els dos cabals màssics dels corrents. També es determina la temperatura fent una aproximació segons els cabals màssics de cada corrent.

$$T_3 = T_2 * \frac{m_2}{m_{tot}} + T_1 * \frac{m_1}{m_{tot}} \quad (50)$$

Amb aquesta fórmula s'obté una temperatura de 105,6 °C. Seguidament, se sumen els cabals d'energia d'ambdós corrents per obtenir l'energia del corrent d'entrada a la torre. En sumar les energies obtingudes de la taula de corrents del capítol 2, es determina que el cabal d'energia del corrent d'entrada a la torre és de $-4,72 * 10^8$ kJ/h. Una vegada es té aquest corrent i el de sortida, que també s'extreu de la taula de corrents, es pot calcular la diferència de cabal d'energia per determinar la quantitat d'energia que ha de dissipar la torre.

$$H = H_S - H_E \quad (51)$$

$$H = -4,74 * 10^8 - (-4,72 * 10^8) = -2 * 10^6 \text{ kJ/h}$$

Amb l'energia es pot calcular la potència necessària amb un factor de conversió:

$$P = H \left(\frac{\text{kJ}}{\text{h}} \right) * \frac{\text{h}}{\text{s}} = -2 * 10^6 * \frac{1}{3600} = 5$$

11.12.4 Sistema de generació d'aire comprimit

L'aire comprimit s'utilitza principalment per a l'accionament de vàlvules automàtiques, ja que no hi ha cap altre equip que consumeixi aire de forma significativa. Aquestes vàlvules funcionen amb actuadors pneumàtics i s'estima que requereixen una pressió nominal de 7,0 bar.

Tot i que el consum d'aire pot variar lleugerament segons el tipus d'actuador i la freqüència d'accionament, per assegurar el correcte funcionament s'ha considerat un consum màxim estimat de 2,35 m³/h per vàlvula. Sabent que la planta té exactament 46 vàlvules automàtiques, es calcula el cabal total de la demanda contínua d'aire comprimit a partir de l'equació 51:

$$Q_{demanda} = C \cdot n \quad (51)$$

On:

- $Q_{demanda}$: cabal de la demanda contínua de la planta (m³/h)
- C : consum per vàlvula (m³/h)
- n : número de vàlvules

$$Q_{demanda} = 2,35 \text{ m}^3/\text{h} \cdot 46 = 108 \text{ m}^3/\text{h}$$

Un cop analitzades les necessitats d'aire comprimit de la planta, s'ha estimat un cabal total necessari de 108 m³/h, equivalent a 1,8 m³/min. Tot i això, per garantir un marge de seguretat davant possibles consums simultanis, variacions de cicle o futures ampliacions, s'ha decidit sobredimensionar el sistema fins a un cabal de disseny de 159,6 m³/h (2,66 m³/min).

11.12.5 Transformador elèctric

El transformador trifàsic té la funció de reduir la tensió fins al valor nominal dels consums de la planta (400 V entre fases i 230V entre fase i neutre). S'estima que la potència total activa de la planta és d'exactament 111,70 kW.

Per fer el dimensionament de la capacitat del transformador, es calcula la potència aparent requerida de la planta, tenint en compte un factor de potència estimat de 0,85.

$$S_{planta} = \frac{P_{instal·lada}}{\cos\phi} = \frac{111,70kW}{0,85} = 131,41kVA \quad (52)$$

A partir d'aquest valor de base, s'aplica l'equació de disseny per al dimensionament de la subestació elèctrica mitjançant un factor de seguretat o sobredimensionament (f_s):

$$S_{transformador} = S_{planta} \cdot f_s \quad (53)$$

On:

- $S_{transformador}$: Potència aparent nominal mínima del transformador (kVA).
- S_{planta} : Potència aparent requerida per la instal·lació (kVA).
- f_s : Factor de seguretat per absorbir pics d'arrencada de grans motors, simultaneïtat de càrregues o futures ampliacions de la planta.
-

Si es considera un factor de correcció de 1,2, s'obté la potència següent:

$$S_{transformador} = 131,41kVA \cdot 1,2 = 160 \text{ kVA}$$

Per aquest motiu, s'ha seleccionat un transformador comercial normalitzat amb una potència nominal de 160 kVA.