



Escola Tècnica Superior
d'Enginyeria



Universitat Autònoma de
Barcelona

PROJECTE FINAL DE CARRERA D'ENGINYERIA QUIMICA



PLANTA FARMACÈUTICA DE PRODUCCIÓ DE PARACETAMOL



VOLUM V

Tutor: Antoni Sanchez i Ferrer

12 de Juny de 2009.
Cerdanyola del Vallès.

Marçal Bosch i Llorente

Hug Chardon i Fabra

Ester Fontcuberta i Butinyac

David López Morales

Marisa Erencia Millan

MANUAL DE CÀLCUL

11. MANUAL DE CÀLCUL

11.1 Disseny dels tancs d'emmagatzematge de líquids.....	11-1
11.1.1 Tanc d'emmagatzematge d'àcid nítric.....	11-1
11.1.1.1 Disseny funcional.....	11-1
11.1.1.2 Disseny mecànic.....	11-4
11.1.2 Tanc d'emmagatzematge d'àcid sulfúric.....	11-12
11.1.3 Tanc d'emmagatzematge d'etanol.....	11-13
11.1.4 Tanc d'emmagatzematge d'anhídrid acètic.....	11-15
11.1.5 Tanc d'emmagatzematge d'àcid acètic.....	11-16
11.1.6 Resum dels tancs d'emmagatzematge.....	11-17
11.2 Disseny del parc de tancs.....	11-20
11.2.1 Cubeta de retenció de l'etanol.....	11-21
11.2.2 Cubeta de retenció de l'àcid nítric.....	11-21
11.2.3 Cubeta de retenció de l'àcid sulfúric.....	11-21
11.2.4 Cubeta de retenció de l'àcid acètic.....	11-22
11.2.5 Cubeta de retenció del fenol.....	11-22
11.2.6 Resum de les dimensions del parc de tancs.....	11-23
11.3 Disseny de les sitges d'emmagatzematge de sòlids.....	11-25
11.3.1 Sitges de paracetamol.....	11-25
11.3.1.1 Dimensions de la sitja.....	11-25
11.3.1.2 Disseny mecànic.....	11-26
11.3.2 Sitges de ortofenol.....	11-28
11.3.2.1 Dimensions de la sitja.....	11-28
11.3.2.2 Disseny mecànic.....	11-29
11.4 Tancs intermedis d'emmagatzematge.....	11-30
11.4.1 Tancs intermedis per a productes.....	11-30
11.4.2 Tancs previs a cristal·litzadors.....	11-34
11.5 Mescladors.....	11-35
11.5.1 Tanc de dil·lució de paranitrofenol.....	11-35
11.5.2 Tanc d'addició d'etanol.....	11-45

11.5.3 Tanc de dil·lució de fenol.....	11-49
11.6 Tancs pulmó.....	11-56
11.7 Columnes de destil·lació.....	11-60
11.7.1 Disseny pel mètode Short Cut.....	11-62
11.7.2 Disseny pel mètode Distillation Column.....	11-62
11.7.3 Dimensionament de la columna.....	11-66
11.8 Disseny del flash.....	11-73
11.9 Disseny dels reactors.....	11-80
11.9.1 Reactor per a la nitració de fenol.....	11-80
11.9.1.1 Balanç de matèria.....	11-81
11.9.1.2 Volum del reactor.....	11-83
11.9.1.3 Dimensionament del reactor.....	11-84
11.9.1.4 Balanç d'energia.....	11-85
11.9.1.5 Disseny mecànic.....	11-88
11.9.2 Reactor tèrmic.....	11-96
11.9.3 Reactor per a la hidrogenació del p-nitrofenol.....	11-97
11.9.3.1 Balanç de matèria.....	11-97
11.9.3.2 Volum del reactor.....	11-100
11.9.3.3 Balanç d'energia.....	11-102
11.9.3.4 Disseny mecànic.....	11-110
11.9.4 Reactor de l'acetilació del p-aminofenol.....	11-115
11.9.4.1 Expressió de la constant cinètica.....	11-15
11.9.4.2 Volum del reactor.....	11-119
11.9.4.3 Balanç de matèria i energia.....	11-121
11.10 Cristal·litzadors.....	11-126
11.11 Condensadors.....	11-136
11.12 Reboilers.....	11-151
11.13 Assecadors fluïditzats.....	11-153
11.14 Refredadors fluïditzats.....	11-160
11.15 Ciclons.....	11-163
11.16 Evaporadors.....	11-168
11.16.1 Disseny de l'evaporador E-501.....	11-168

11.16.2	Disseny de l'evaporador E-502.....	11-173
11.17	Columna d'arrossegament amb vapor.....	11-176
11.18	Serveis.....	11-185
11.18.1	Chiller.....	11-185
11.18.2	Aigua de refrigeració.....	11-187
11.18.3	Estació transformadora.....	11-191
11.19	Scripts de Matlab.....	11-192
11.19.1	Reactor de nitració.....	11-192
11.19.2	Reactor d'hidrogenació.....	11-204
11.19.3	Reactor d'acetilació.....	11-208
11.19.4	Cristal·litzadors Z-401 i Z.402	11-211

11. MANUAL DE CàLCUL

11.1. DISSENY DELS TANCS D'EMMAGATZEMATGE DE LÍQUIDS

Consideracions de disseny:

- Els tancs d'emmagatzematge s'han dissenyat com a tancs atmosfèrics, i per tant, es basen en la norma DIN 28011.
- S'ha de diferenciar entre volum útil i volum real. El volum útil és el mínim necessari i el volum real és el que es considera en excés, tenint en compte les possibles variacions de cabal subministrat o petits moviments de líquid dins del tanc en el moment de càrrega i descàrrega.
- Segons la normativa aplicada, la relació entre altura i diàmetre del tanc és 1,5.
- Un cop trobada l'altura del tanc es calcularan els gruixos de les xapes dels tancs en funció de la normativa ASME a pressió interna.

11.1.1. Tanc d'emmagatzematge d'àcid nítric

11.1.1.1. Disseny funcional

A continuació es mostra el procediment seguit pel càlcul de la capacitat dels tancs d'emmagatzematge. Es mostra com a exemple el disseny del tanc d'àcid nítric.

El procés es realitza en discontinu, amb el qual no és necessari el càlcul d'un cabal volumètric, sinó de la quantitat de nítric necessària per a cada batch, tenint en compte els batchos realitzats al dia.

Les dades necessàries pel càlcul dels tancs d'emmagatzematge s'obtenen a partir dels balanços de matèria i energia, de manera que s'obtenen les necessitats de càrrega, i per tant, necessitats d'emmagatzematge.

- Litres d'àcid nítric (de puresa 68 %) d'entrada al primer reactor per batch:

$$\left(3324 \text{ Kg nítric pur} \cdot \frac{32 \text{ Kg aigua}}{68 \text{ Kg nítric pur}} \right) = 1564,25 \text{ Kg aigua}$$

$$3324 \text{ Kg nítric pur} + 1564,25 \text{ kg aigua} = 4889 \text{ Kg nítric 68\%}$$

No tot el nítric necessari per cada batch procedirà dels tancs d'emmagatzematge, donat que part es recupera a la zona de purificació. Concretament la recirculació serà de 964 kg d'àcid al 68% provinent de la columna de destil·lació, més 1041,5 Kg que es formen al reactor tèrmic, de manera que el nítric necessari per cada batch procedent del parc de tancs serà:

$$4889 \text{ kg nítric 68\%} - 964 \text{ kg nítric 68\% recirculat} \\ - 1041,5 \text{ Kg reactor tèrmic} = 2884 \text{ kg nítric 68\%}$$

$$2884 \text{ Kg nítric 68 \% } \frac{1000 \text{ litres}}{1500 \text{ Kg àcid}} = 1922,6 \text{ litres/batch}$$

Donat que la planta realitza un total de 6 batchos al dia:

- Litres d'àcid nítric necessaris en un dia de treball:

$$1922,6 \frac{\text{litres àcid nítric}}{\text{batch}} \cdot 6 \frac{\text{batch}}{\text{dia}} = 11536 \text{ litres àcid nítric 68\% /dia}$$

Un cop es disposa de la quantitat d'àcid necessària per un dia de treball, s'ha de tenir en compte els dies entre càrrega i càrrega del tanc d'emmagatzematge. En aquest cas els proveïdors faran la distribució d'àcid cada 4 dies laborables.

- Litres necessaris a emmagatzemar segons el període d'emmagatzematge:

$$11536 \frac{\text{litres àcid}}{\text{dia laborable}} \cdot 4 \text{ dies laborables} = 46144 \text{ litres àcid}$$

$$46144 \text{ litres nítric } 68 \% \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{1000 \text{ litres}} = 46,144 \text{ m}^3 \text{ àcid nítric}$$

En el disseny dels tancs d'emmagatzematge no és suficient emmagatzemar el volum necessari de nítric utilitzat en el procés, sinó que cal un marge, sobredimensionat, per tal que el 30 % del tanc quedi sempre amb solució:

- Volum tanc tenint en compte el 30 % sobredimensionat:

$$\text{Volum amb } 30\% = \text{Volum tanc} + (\text{Volum tanc} \cdot 0,3) =$$

$$= 46,1 \text{ m}^3 + (46,1 \text{ m}^3 \cdot 0,3) = 59,9 \text{ m}^3$$

S'ha decidit col·locar 4 tancs d'emmagatzematge de nítric de 20 m³.

Un cop definit el volum necessari que ha de tenir el tanc d'emmagatzematge de nítric es passa a calcular les especificacions :

- Càlcul del diàmetre del tanc:

$$\circ \text{ Volum fons superior} = \frac{1}{12} \pi \cdot De^3$$

$$\circ \text{ Volum cilindre} = \frac{1,5}{4} \pi \cdot De^3$$

Combinant les dues equacions:

$$De = \left(\frac{\text{Volum fons superior} + \text{Volum cilindre}}{\left(\frac{1,5}{4}\pi\right) + \left(\frac{1}{12}\pi\right)} \right)^{1/3} = \left(\frac{20 \text{ m}^3}{\left(\frac{1,5}{4}\pi\right) + \left(\frac{1}{12}\pi\right)} \right)^{1/3} = 2,4 \text{ m}$$

Es pren un diàmetre extern de 2,5 metres. Aquesta dada permet seguir amb els càlculs.

- Càlcul de l'altura del cilindre:

$$Altura\ cilindre = 1,5 \cdot De = 1,5 \cdot 2,5\ m = 3,75\ metres$$

- Càlcul del volum del fons superior toriesfèric:

S'ha escollit un gruix de paret suficient segons la bibliografia, per aquest diàmetre.

$$E = 0,005\ m$$

$$Volum\ fons\ superior\ toriesfèric = 0,1 \cdot Di^3 = 0,1 \cdot (2,5 - 2 \cdot 0,005)^3 = 0,25\ m^3$$

- Altura del fons superior toriesfèric:

$$Altura\ fons = (0,2 \cdot De) + (1,5 \cdot e) = (0,2 \cdot 2,5) + (1,5 \cdot 0,005) = 0,5075\ m$$

- Altura total del tanc:

$$Altura\ total = altura\ fons + altura\ cilindre = 0,5075 + 3,75 = 4,3\ m = 4,5\ m$$

11.1.1.2. Disseny mecànic

Pel disseny dels tancs s'ha seguit la normativa ASME i la norma MIE-APQ-001, encarregada de l'emmagatzematge de líquids inflamables i combustibles.

- Pressió de disseny

La pressió de disseny és la pressió emprada en el disseny d'un recipient. És necessari mantenir una certa sobrepressió a l'interior respecte a la pressió externa per tal que no entri aire de l'exterior. També serveix com a marge de seguretat en el cas que sorgeixi algun problema i es treballi a una pressió major a la de treball.

Per escollir la pressió de disseny, s'ha calculat la diferència de pressió des de la superfície del fluid fins al fons amb la fórmula següent:

$$\Delta P = \rho \cdot g \cdot h$$

Per exemple, en el cas del tanc d'emmagatzematge de l'àcid nítric:

$$\Delta P = 1500 \frac{kg}{m^3} \cdot 9,81 \frac{m}{s^2} \cdot 4,5 = 66217,5 Pa = 0,66 bar$$

La pressió que fa el líquid al fons de l'equip és de 0,66 bar però a aquesta pressió se li ha de sumar l'atmosfèrica. Després de tot això, es fa un sobredimensionament d'un 15% i s'obté una pressió de disseny de 2bar.

$$P_{disseny} = P_{atm} + \Delta P + (P_{atm} + \Delta P) \cdot 0,1 = 1,82 = 2 bar$$

- Temperatura de disseny

Pel càlcul de la temperatura de disseny es segueix el mateix criteri que per la pressió de disseny. Aquesta temperatura es determinarà com:

$$T_{disseny} = T_{treball} + 20^{\circ}C$$

- Material de construcció

L'elecció del material a utilitzar es realitza en base als següents factors:

- La temperatura de disseny.
- La pressió de disseny.
- Las característiques corrosives del fluid contingut al recipient.
- El cost.
- La disponibilitat al mercat de mesures estàndards.

Els materials emprats comunament en la construcció de recipients són: acer al carboni, acer de baix aliatge i acers inoxidables. Degut a que els productes dels que es disposa són corrosius i inflamables, s'ha decidit emprar acers inoxidables, donat que, tot i que el seu cost és superior als acers al carboni o de baix aliatge, és més econòmic al compensar-se amb el gruix de corrosió necessari.

En el cas de l'àcid sulfúric, però, no és possible aplicar materials metàl·lics per al seu emmagatzematge, donada l'alta corrosió que presenta sobre els materials. Per a aquest compost, doncs, s'aplicaran materials plàstics, que presenten una corrosió inferior en contacte amb l'àcid. Els materials plàstics més comuns són: PVC, polietilè i polipropilè. En aquest projecte s'ha decidit emprar el polietilè com el material òptim per a l'emmagatzematge, tant per qüestions econòmiques com mediambientals, evitant el clor que porta el PVC.

- Sobreessessor de corrosió

En tot equip s'ha de determinar un sobreessessor de corrosió per compensar la corrosió que van patint els equips. Aquest valor és habitualment igual al màxim essessor corroït amb previsió de deu anys, i a la pràctica oscil·la entre 1 i 6 mm, incrementant-se als essessors obtinguts per resistir les càrregues que es troben sotmesos els recipients.

- Eficiència de soldadura

La unió entre xapes es realitza, normalment, per mitjà de soldadura, i aquesta representa una discontinuïtat dins del traç de la xapa. Aquesta raó, junt amb la possibilitat de produir-se defecte en la realització de la soldadura i l'escalfament i ràpid refredament al que està sotmesa la zona més pròxima a la soldadura, donant peu a considerar la zona de soldadura com debilitada.

Tenint en compte això, s'introdueix en el càlcul dels recipients una reducció de la tensió màxima admissible multiplicant a aquesta per un coeficient denominat eficiència de soldadura (E). Segons la bibliografia el valor de l'eficiència és: $E=0,85$, considerant que el radiografiat es realitza als punts de soldadura.

- Tensió màxima admissible ($S_{m\grave{a}x}$)

Aquesta tensió depèn de les característiques del material i del coeficient de seguretat que s'adopti, variant la temperatura de treball.

- Velocitat o pressió del vent

Tots els equips instal·lats a l'exterior estan sotmesos a l'acció del vent. Això afectarà més en el cas que els equips estiguin a una gran alçada. En aquest cas els tancs estaran a l'exterior, però es considerarà l'acció del vent suficientment petita com per no tenir-la en compte en el disseny.

- Coeficient sísmic

L'acció sísmica no és uniforme a la terra, existint diversa probabilitat de produir-se moviments sísmics en unes o altres zones. Tot i això, a la planta present no es considerarà l'activitat sísmica a l'hora de realitzar el disseny.

- Connexions

Les connexions més comunes en un recipient són les següents:

- D'entrada i sortida de fluids.
- Per reguladors de nivell.
- Per vàlvula de seguretat.
- Per serveis com: drenatge, venteig de neteja, etc.

Les connexions a un recipient per les que el líquid pugui circular portaran una vàlvula manual externa situada al més pròxim a la paret del recipient.

Les connexions per sota de nivell del líquid, a través de les quals aquest no circula, portaran un tancament estanc.

Les connexions d'entrada al recipient destinades a contenir líquids de la classe B estaran dissenyades per minimitzar la possibilitat de generar electricitat estàtica.

Excepte en casos excepcionals, les connexions es realitzen amb brides, ja que permeten un muntatge i desmuntatge sense haver de realitzar cap tall ni soldadura. Només en casos de fluids extremadament tòxics, o altament explosius en contacte amb l'aire, es realitzaran les connexions soldades.

- Venteigs

Tot recipient ha de disposar de sistemes de venteig per tal de prevenir la formació de buit o pressió interna, de manera que s'eviti la deformació del mateix com a conseqüència de les variacions de pressió produïdes per efecte de les càrregues, descàrregues o canvis de temperatura.

Els venteigs normals d'un recipient tindran, com a mínim, un tamany igual al major de les tuberies de càrrega i descàrrega, i en cap cas inferior a 35 mm de diàmetre interior.

En cas de recipients amb capacitats superiors a 5 m³ que emmagatzemin líquids de la subclasse B1, el venteig estarà normalment tancat, excepte quan es ventegi a la atmosfera en condicions de pressió interna o buit.

En el cas que un producte, per defecte de l'acció de la humitat de l'aire, augmenti la seva acció corrosiva, es tindrà en compte aquest efecte per disposar d'un sistema que ho eviti o ho corregeixi, excepte que s'hagi previst tal possibilitat en el disseny.

Tant en líquids tòxics com corrosius, s'ha d'evitar sempre que sigui possible l'emissió a l'atmosfera de vapors perjudicables de líquids corrosius o tòxics, i en tot cas, controlar els seus efectes.

- Inertització

En els emmagatzematges de superfície per a líquids de la subclasse B1 (fenol), en tancs de sostre fixe, es redueix el risc d'incendi, al entrar en contacte el producte amb l'oxigen de l'aire, per mitjà de protecció amb gas inert. Si s'adoptés aquesta protecció, s'hauria de mantenir en servei permanent.

Les condicions mínimes que han de complir les instal·lacions d'atmosfera inert són les següents:

- El tipus d'atmosfera inert s'ha d'escollir en funció del producte emmagatzemat, donat que tots dos han de ser compatibles.
- El subministrament de gas inert i el gas contingut en el recipient d'emmagatzematge hauran de ser analitzats periòdicament per comprovar el contingut d'oxigen i/o dels components que puguin ser peril·losos.
- Sistema de creació d'atmosferes inerts: aspiració de gas inert d'un centre d'emmagatzematge adequat i expulsió a l'atmosfera sense posterior recuperació. El conducte d'entrada de gas inert es connectarà en el sostre del recipient d'emmagatzematge. El sistema es dotarà dels elements de control i regulació necessaris que garantitzin el funcionament permanent així com una alarma que avisi de la seva fallada.

- Càlcul dels espessors:

2) Càlcul de la gruixa necessària per a la part de tanc:

Segons la bibliografia, l'espessor dels fons dels recipients han de ser majors al de la carcassa o cilindre del mateix, donat que ha de suportar més pressió. L'espessor màxim és de 25 mm.

Per realitzar un disseny més acurat dels gruixos necessaris s'utilitzarà la normativa ASME, segons la qual:

$$t = \frac{P \cdot R}{S \cdot E - 0,6 \cdot P} + C_1 + C_2$$

On:

P: Pressió de disseny interna (P=2 atm)

R: Radi intern del cilindre, mm (R= 1200 mm)

E: Factor de soldadura. (E= 0.85)

S: Límit elàstic (depèn del material escollit i la temperatura) (S=1450 bar)

C₁: Tolerància a la corrosió, mm (1mm)

C₂: Tolerància a la fabricació, mm (0mm)

S'obté un valor de 1,94, pel tanc d'àcid nítric. S'agafa un gruix de xapa d'acer de 5 mm.

b) Càlcul d'el gruix necessari per fons superior torisfèric:

$$t = \frac{0,885 \cdot P \cdot L}{S \cdot E - (0,1 \cdot P)} + C_1 + C_2$$

On:

P: Pressió de disseny interna (P=2 atm)

L : Diàmetre intern del cilindre, mm (R= 2400 mm)

E: Factor de soldadura. (E= 0.85)

S: Límit elàstic (depèn del material escollit i la temperatura) (S=1450 bar)

C₁: Tolerància a la corrosió, mm (1mm)

C₂: Tolerància a la fabricació, mm (0mm)

S'obté un valor de 4,44 pel tanc d'àcid nítric. S'agafa un gruix de xapa d'acer de 5 mm.

- Pes dels equips

2) Pes de l'equip buit:

A continuació es calcula el pes del tanc d'emmagatzematge de l'àcid nítric, com a exemple de càlcul.

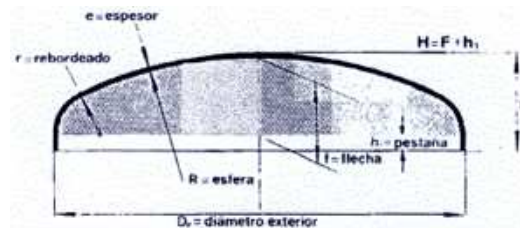
- Càlcul de la superfície del cilindre:

$$Sup\ cilindre = \pi \cdot De \cdot Altura\ tanc = \pi \cdot 2,5 \cdot 3,75 = 29,45\ m^2$$

- Càlcul del volum d'acer al cilindre:

$$\begin{aligned} Volum\ acer\ al\ cilindre &= Sup\ cilindre \cdot espessor\ cilindre = \\ &= 29,45\ m^2 \cdot 0,005 = 0,14\ m^3 \end{aligned}$$

- Càlcul del fons torisfèric:



$$\begin{aligned} Sup\ fons &= \frac{\pi}{2} \cdot Dp^2 + De \cdot (De - 2 \cdot Dp) = \frac{\pi}{2} \cdot 0,5^2 + 2,5 \cdot (2,5 - 2 \cdot 0,5) = 4,14 \\ &= 4,2\ m^2 \end{aligned}$$

$$On: Dp = 2 \cdot 0,1 \cdot De = 2 \cdot 0,1 \cdot 2,5 = 0,5\ m$$

- Càlcul del volum d'acer al fons:

$$Volum\ d'aceral\ fons = Sup\ fons \cdot espessor\ fons = 4,2 \cdot 0,005 = 0,02\ m^3$$

- Càlcul del volum total d'acer al recipient:

$$Volum\ d'acer = Vol.\ acer\ cil + Vol.\ acer\ fons = 0,14 + 0,02 = 0,16\ m^3$$

- Càlcul del pes del recipient buit:

$$Pes\ recipient\ buit = Vol.\ acer \cdot Densitat\ acer = 0,16m^3 \cdot 7860 \frac{kg}{m^3} = 1250\ Kg$$

b) Pes d' l'equip pl d'igua:

$$\begin{aligned} Pes\ recipient\ amb\ agua &= Pes\ recipient\ buit + (Volum\ líquid \cdot densitat\ agua) = \\ &= 1250\ Kg + \left(16,3\ m^3 \cdot 1000 \frac{kg}{m^3} \right) = 17550\ Kg \end{aligned}$$

c) Pes d' l'equip pl d'àcid nítric:

$$\begin{aligned} Pes\ recipient\ amb\ líquid &= Pes\ recipient\ buit + (Volum\ líquid \cdot densitat\ nítric) = \\ &= 1250\ Kg + \left(16,3\ m^3 \cdot 1500 \frac{kg}{m^3} \right) = 25700\ Kg \end{aligned}$$

11.1.3. Tanc d'emmagatzematge d'àcid sulfúric

En el cas de l'àcid sulfúric, és un reactiu que no es consumeix a la reacció, sinó que actua com a catalitzador, de manera que es recuperarà en el procés de rectificació, amb una pèrdua d'un 0,1 % per batch. Tot i això, per seguretat, es col·locaran uns tancs d'emmagatzematge d'àcid sulfúric al parc de tancs, suficients per poder emmagatzemar l'àcid necessari per a la realització d'un batch de procés.

- Litres d'àcid sulfúric (de puresa 98 %) d'entrada al primer reactor per batch:

$$\left(4855 \text{ Kg sulfúric pur} \cdot \frac{2 \text{ Kg aigua}}{98 \text{ Kg sulfúric pur}} \right) = 99 \text{ Kg aigua}$$

$$4855 \text{ Kg sulfúric pur} + 99 \text{ kg aigua} = 4954 \text{ Kg sulfúric 98\%}$$

Tenint en compte la densitat de l'àcid:

$$4954 \text{ Kg sulfúric 98 \% } \frac{1000 \text{ litres}}{1844 \text{ Kg ácid}} = 2686,5 \text{ litres/batch}$$

$$2686,5 \text{ Kg sulfúric 98 \% } \frac{1 \text{ m}^3 \text{ ácid}}{1000 \text{ litres ácid}} = 2,68 \text{ m}^3/\text{batch}$$

A diferència de l'emmagatzematge d'àcid nítric, en aquest cas serà suficient un tanc de sulfúric que permeti l'emmagatzematge d'aquests $2,68 \text{ m}^3$ d'àcid, que serà la quantitat necessària per a dur a terme un batch en el procés, donat que seguidament la purificació recuperarà l'àcid per reintroduir-lo en el sistema.

Per contemplar que el tanc mai romangui buit es calcula un sobredimensionament del 30%, de manera que:

$$Volum \text{ amb } 30\% = Volum \text{ tanc} + (Volum \text{ tanc} \cdot 0,3) =$$

$$= 2,68 \text{ m}^3 + (2,68 \cdot 0,3) = 3,48 \text{ m}^3 = 3,5 \text{ m}^3$$

Aquest mateix plantejament es durà a terme amb l'etanol, dissolvent de la reacció d'hidrogenació, que també presenta un procés de purificació en el qual es recuperarà.

11.1.4. Tanc d'emmagatzematge d'etanol

L'etanol actua com a dissolvent a la reacció d'hidrogenació. Part de l'etanol que intervé es recircula, i part s'haurà d'incorporar de nou cada batch. L'etanol que surt del reactor

d'hidrogenació passa a dos evaporadors en sèrie encarregats d'eliminar part d'aquest etanol i tornar a recircular-ho al reactor. La part d'etanol que no es pot recuperar en el procés de purificació, i que per tant s'haurà d'afegir de nou, contemplant el seu emmagatzematge són: $0,9 \text{ m}^3/\text{dia}$.

Es pot observar com el volum necessari d'etanol al dia és petit. S'ha decidit la col·locació de dos tancs d'emmagatzematge d'etanol, de 20 m^3 cada un.

- Diàmetre del tanc:

$$De = \left(\frac{\text{Volum fons superior} + \text{Volum cilindre}}{\left(\frac{1,5}{4}\pi\right) + \left(\frac{1}{12}\pi\right)} \right)^{1/3} = \left(\frac{20 \text{ m}^3}{\left(\frac{1,5}{4}\pi\right) + \left(\frac{1}{12}\pi\right)} \right)^{1/3} = 2,4 \text{ m}$$

S'escull un diàmetre de 2,5 m.

- Càlcul de l'altura del cilindre:

$$\text{Altura cilindre} = 1,5 \cdot De = 1,5 \cdot 2,5 \text{ m} = 3,75 \text{ metres}$$

- Càlcul del volum del fons superior toriesfèric:

El gruix de paret dels tancs serà el mateix que per la resta de tancs calculats: 5 mm.

$$\text{Volum fons} = 0,1 \cdot Di^3 = 0,1 \cdot (2,5 - 2 \cdot 0,005)^3 = 0,25 \text{ metres}$$

- Altura del fons superior toriesfèric:

$$\text{Altura fons} = (0,2 \cdot De) + (1,5 \cdot e) = (0,2 \cdot 2,5) + (1,5 \cdot 0,005) = 0,5075 \text{ m}$$

- Altura total del tanc:

$$\begin{aligned} \text{Altura total} &= \text{altura fons} + \text{altura cilindre} = 0,5075 + 3,75 = 4,3 \text{ m} \\ &= 4,5 \text{ m} \end{aligned}$$

La capacitat de cada tanc serà igual al volum del cilindre, de manera que:

- Capacitat tanc:

$$\text{Capacitat cilindre} = \pi \cdot r^2 \cdot h_{\text{cilindre}} = \pi \cdot \left(\frac{2,5}{2}\right)^2 \cdot 3,75 = 18,4$$

Sabent que es gasten $0,9 \text{ m}^3/\text{dia}$, els dies necessaris entre càrrega i càrrega dels dos tancs:

- Dies càrrega

$$\text{Dies càrrega} = \frac{18,4 \text{ m}^3 \cdot 2 \text{ tancs}}{0,9 \text{ m}^3/\text{dia}} = 41 \text{ dies}$$

Per tal de no arriscar la producció es decideix que arribi a planta 1 camió d'etanol amb $18,4 \text{ m}^3$ per tal de carregar un tanc cada 41 dies, garantint que sempre hi haurà un tanc ple, quan l'altre s'acabi.

11.1.5. Tanc d'emmagatzematge d'anhídrid acètic

L'Anhídrid acètic s'utilitza en el procés com a reactiu de la reacció d'acetilació del p-aminofenol. Tot l'anhídrid es consumeix en el procés, de manera que no serà possible la seva recuperació per purificació, així que tot el producte que es consumeix s'ha de reincorporar dels tancs d'emmagatzematge.

La quantitat d'anhídrid acètic necessària per un dia d'operació (6 batchos) és de: $17,4 \text{ m}^3/\text{dia}$.

S'ha decidit la col·locació de 4 tancs d'emmagatzematge de 20 m³, per tal d'establir una mesura estàndard dels tancs presents al parc de tancs. De manera que les dimensions del reactors són equivalents a les calculades anteriorment per l'etanol i nítric.

- Diàmetre del tanc: 2,5 m
- Càlcul de l'altura del cilindre: 3,75 m
- Càlcul del volum del fons superior toriesfèric: 0,25 m
- Altura del fons superior toriesfèric: 0,5075 m
- Altura total del tanc: 4,5 m
- Capacitat tanc: 18,4 m³

Sabent que es gasten 17,4 m³/dia, els dies necessaris entre càrrega i càrrega dels dos tancs són:

- Dies càrrega

$$Dies\ càrrega = \frac{18,4m^3 \cdot 4\ tancs}{17,4\ m^3} = 4\ dies$$

Per tal de no arriscar la producció es decideix que a la planta arribi 1 camió per carregar dos dels quatre tancs, cada dos dies.

11.1.6. Tanc d'emmagatzematge d'àcid acètic

L'àcid acètic s'obté com a producte de la reacció d'acetilació. Com que el dissolvent de tal reacció és en gran part aigua, sols s'aconsegueix obtenir àcid acètic al 33%, pel que serà un subproducte del procés. Cal comentar que si no es trobés sortida al mercat, es tractaria o es buscarien alternatives per fer-lo més pur. La quantitat d'aquest àcid produïda en un dia d'operació és de: 36506,2 Kg/dia. De manera que el volum necessari és:

$$Volum\ necessari = 36506,2\ Kg \cdot \frac{1\ m^3}{1030\ kg} = 35,5\ m^3/dia$$

Es decideix col·locar 4 tancs d'emmagatzematge de 20 m³, de manera que:

- Diàmetre del tanc: 2,5 m
- Càlcul de l'altura del cilindre: 3,75 m
- Càlcul del volum del fons superior torisfèric: 0,25 m
- Altura del fons superior torisfèric: 0,5075 m
- Altura total del tanc: 4,5 m
- Capacitat tanc: 18,4 m³

Sabent que es produeixen 35,5 m³/dia, els dies necessaris entre descàrrega i descàrrega dels quatre tancs són:

- Dies descàrrega

$$Dies\ descàrrega = \frac{18,4\ m^3 \cdot 4\ tancs}{35,5\ m^3} = 2\ dies$$

Pel buidatge dels tancs d'àcid acètic es requereix un camió al dia en la planta que s'emporti el volum de dos dels tancs, per deixar-los buits per seguir carregant-ho amb producte.

11.1.7. Resum dels tancs d'emmagatzematge

Taula 11.1. Dada's resum dels tancs d'emmagatzematge.

	Àcid nítric 68%	Àcid sulfúric 98%	Etanol	Anhídrid acètic	Àcid acètic
Litres /dia	15700	-	13688	17400	35500
Temps entre (des)càrregues	4 dies	6 mesos	20 dies	2 dies	1 dia
Volum tanc emmagatzematge (m ³)	47,1	2,68	41	42,3	71,12
Volum sobredimensionat (m ³)	61,2	3,48	53,3	57,25	78,2
Volum real tancs (m ³)	20	5	20	20	20
Número de tancs	4	1	2	4	4

	Àcid nítric 68%	Àcid sulfúric 98%	Etanol	Anhídrid acètic	Àcid acètic
Diàmetre tanc (m)	2,5	1,5	2,5	2,5	2,5
Alçada tanc (m)	4,5	2,5	4,5	4,5	4,5
Espessor cilindre (mm)	5	5	5	5	5
Volum cilindre (m ³)	18,4	4,41	18,4	18,4	18,4
Espessor fons (mm)	5	5	5	5	5
Volum fons superior (m ³)	1,16	0,45	1,16	1,16	1,16
Pes tanc buit (kg)	1250	484,4	1250	1250	1250
Pes tanc amb aigua (kg)	17550	5134,2	17550	17550	1755
Pes tanc amb component (kg)	25700	9058,7	15767,6	22616,5	21576,5

Aquesta taula no contempla l'emmagatzematge de fenol, tot i que també s'emmagatzema al parc de tancs, donat que els tancs de fenols actuen com un mesclador, de forma que s'especifica el seu disseny en l'apartat : Mescladors.

- Recolzaments

Els sistemes de recolzament dels recipients no estan sotmesos ni a pressió interna ni externa, i per tant, normalment no s'introdueixen als codis o normes que regulen els recipients. No obstant, és molt important determinar els espessors necessaris d'aquests elements per garantir l'estabilitat mecànica dels recipients.

Tot i que el projecte no es centra en el càlcul d'aquestes estructures a continuació s'exposen una sèrie de recomanacions a tenir en compte en cada un dels tipus.

2) Faldó:

- El diàmetre mitjà del faldó i del recipient tindran el mateix valor, per tal d'evitar moviments deguts al pes.

- L'espessor mínim del faldó serà de 6 mm, en cas que el recipient tingui un espessor igual o superior a aquests 6 mm.
- El material del faldó serà, generalment, acer al carboni.
- L'anell base tindrà una amplada de 250 mm i un espessor mínim de 20 mm.
- El número de pernys serà múltiple de 4; la distància entre ells no serà menor de 400 mm, ni superior a 600 mm, i el seu diàmetre estarà comprès entre 16 mm i 60 mm.

b) Potes:

- El número de potes serà de 3 o 4.
- Las potes seran construïdes amb perfils comercials, normalment en L, i de forma habitual en acer al carboni, excepte la placa de reforç soldada directament al recipient, que serà del mateix material d'aquest.

c) Mènsules:

- Es fabriquen d'acer al carboni, excepte la placa de reforç soldada directament al recipient, que serà del mateix material que aquest.
- El seu número serà de 2, 4 i 8.

d) Còndirs:

- La distància des de l'eix de la base de la línia de tangència serà, normalment, igual a un quart de diàmetre interior del recipient ($0,25 D_i$).
- L'angle que envolta la cadira al recipient estarà comprès entre 120° i 140° .
- El material de construcció, de la mateixa manera que les mènsules i les potes, és d'acer al carboni, excepte les xapes de reforç.

2) Prova hidràulica:

Tot recipient ha de ser comprovat abans de la seva posada en marxa. Una de les comprovacions consisteix en l'assaig de la prova hidràulica del recipient a una pressió major que la de disseny.

Segons la normativa la pressió hidràulica es calcula:

$$P_{HM} = 1,5 \cdot P \cdot \frac{\sigma_a}{\sigma}$$

On: P_{HM} : Pressió hidràulica mínima, Kg/cm²

P: Pressió de disseny, Kg/cm²

σ_a : Tensió màxima admissible a temperatura de disseny, Kg/mm²

σ : Tensió màxima admissible a temperatura ambient, Kg/mm²

Cal destacar que el reglament espanyol utilitza un valor de 1,3 en comptes de 1,5. En aquest cas la tensió màxima admissible a temperatura de disseny i a temperatura ambient no varia, d'acord amb la bibliografia. Tenint en compte aquests dos aspectes, la pressió hidràulica es calcularà com:

$$P_{HM} = 1,3 \cdot P = 1,3 \cdot 2 = 2,6 \text{ atm}$$

Aquesta pressió és la mateixa per a tots els tancs, donat que tots treballen a pressió atmosfèrica.

11.2. DISSENY DEL PARC DE TANCS

Per realitzar aquest disseny s'ha seguit la norma MIE-APQ-001 i MIE-APQ-006 que parla de l'emmagatzematge de productes inflamables i corrosius respectivament. Les cubetes de retenció s'encarreguen de que en cas de fuga del producte emmagatzemat, la cubeta ho pugui retenir.

Les cubetes han de poder contenir el volum total del tanc més gros, o bé el 10% del volum global de tots els tancs. Segons la norma, els tancs han d'anar disposats com a màxim en 2 files, separats per una distància mínima entre ells de 1,5 m els d'etanol i fenol i 1 metre els de àcid nítric. També s'ha de separar 1m entre la paret de la cubeta i la paret del tanc.

11.2.1. Cubeta de retenció de l'etanol

- a) Volum del tanc més gran: 20 m^3 .
- b) 10% del volum global dels tancs.

$$\text{Volum 1 tanc} \cdot \text{numero tancs} \cdot 0,10 = 20 \cdot 2 \cdot 0,1 = 4 \text{ m}^3$$

Com es pot observar l'opció a) és major que l'opció b), pel que es decideix que la cubeta de retenció del etanol hi càpiga com a mínim 20 m^3 .

11.2.2. Cubeta de retenció de l'àcid nítric

- c) Volum del tanc més gran: 20 m^3 .
- d) 10% del volum global dels tancs.

$$\text{Volum 1 tanc} \cdot \text{numero tancs} \cdot 0,10 = 20 \cdot 4 \cdot 0,1 = 8 \text{ m}^3$$

Com es pot observar l'opció c) és major que l'opció d), pel que es decideix que la cubeta de retenció de l'àcid nítric hi càpiga com a mínim 20 m^3 .

11.2.3. Cubeta de retenció de l'àcid sulfúric

- e) Volum del tanc més gran: 5 m^3 .
- f) 10% del volum global dels tancs.

$$\text{Volum 1 tanc} \cdot \text{numero tancs} \cdot 0,10 = 5 \cdot 1 \cdot 0,1 = 0,5 \text{ m}^3$$

Com es pot observar l'opció e) és major que l'opció f), pel que es decideix que la cubeta de retenció de l'àcid sulfúric hi càpiga com a mínim 5 m^3 .

11.2.4. Cubeta de retenció de l'àcid acètic

- g) Volum del tanc més gran: 20 m^3 .
- h) 10% del volum global dels tancs.

$$\text{Volum 1 tanc} \cdot \text{numero tancs} \cdot 0,10 = 20 \cdot 4 \cdot 0,1 = 8 \text{ m}^3$$

Com es pot observar l'opció g) és major que l'opció h), pel que es decideix que la cubeta de retenció de l'anhidrid acètic hi càpiga com a mínim 20 m^3 .

11.2.5. Cubeta del fenol

- i) Volum del tanc més gran: 20 m^3 .
- j) 10% del volum global dels tancs.

$$\text{Volum 1 tanc} \cdot \text{numero tancs} \cdot 0,10 = 20 \cdot 4 \cdot 0,1 = 8 \text{ m}^3$$

Com es pot observar l'opció i) és major que l'opció j), pel que es decideix que la cubeta de retenció del fenol hi càpiga com a mínim 20 m^3 .

Sabent les dades, es poden calcular les dimensions de la cubeta, l'amplada (B) i l'allargada (L). A continuació es fa un càlcul exemple del parc de tancs d'àcid nítric.

$$B = 2 \cdot \text{Dist paret tanc} + 2 \cdot \text{Diametre tanc} + \text{Dist tanc, tanc} = 2 \cdot 1 + 2 \cdot 2,5 + 1 = 8 \text{ m}$$

$$L = 2 \cdot \text{Dist paret tanc} + 3 \cdot \text{Diametre tanc} + (n^{\circ} \text{ tanc} - 1) \cdot \text{Dist tanc, tanc} = \\ = 2 \cdot 1 + 3 \cdot 2,5 + (4 - 1) \cdot 1 = 12,5 \text{ m}$$

D'aquesta manera, sabent quants tancs es necessiten i el seu volum es pot saber l'alçada necessària de les cubetes, segons l'equació:

$$H_{\text{cubeta}} = \frac{V_{\text{tanc}}}{\text{Area}}$$

$$Area = B \cdot L - \left(\frac{\pi}{4} \cdot D^2\right) \cdot (n^{\circ}tancs - 1)$$

On :

H_{cubeta} = Alçada mínima de la cubeta [m]

V_{tanc} = Volum del suposat tanc trencat, [m³]

Àrea = Àrea disponible entre parets de la cubeta i tancs, [m²]

B i L = Amplada i allargada de la cubeta respectivament, [m]

D = Diàmetre de cada tanc, [m]

n^o tancs = Nombre de tancs que hi ha dins la cubeta

$$Area = 8 \cdot 12,5 - \left(\frac{\pi}{4} \cdot 2,5^2\right) \cdot (4 - 1) = 85,27$$

$$H_{cubeta} = \frac{20}{85,27} = 0,23 \text{ m}$$

Surt una alçada mínima de cubeta de 0,18 metres. Per assegurar la retenció es sobredimensiona un 20% , obtenint una alçada final de:

$$H_{cubeta} = 0,23 + (0,23 \cdot 0,2) = 0,281 \text{ m}$$

11.2.6. Resum de les dimensions del parc de tancs

Taula 11.2. Dimensions dels tancs i de la cubeta de l'etanol.

Dimensions tanc		Dimensions cubeta	
Diàmetre tanc (m)	2,5	Amplada (m)	8,5
Alçada tanc (m)	4,5	Allargada (m)	14
N ^o tancs	2	Alçada (m)	0,23
Volum tanc (m ³)	20	Àrea total ocupada (m ²)	119
Distància tanc-paret (m)	1	Àrea útil cubeta (m ²)	104,3
Distància tanc-tanc (m)	1,5	Volum útil cubeta (m ³)	24

Taula 11.3. Dimensions dels tancs i de la cubeta de l'àcid nítric.

Dimensions tanc		Dimensions cubeta	
Diàmetre tanc (m)	2,5	Amplada (m)	8
Alçada tanc (m)	4,5	Allargada (m)	12,5
Nº tancs	4	Alçada (m)	0,22
Volum tanc (m ³)	20	Area total ocupada (m ²)	100
Distància tanc-paret (m)	1	Area útil cubeta(m ²)	85,3
Distància tanc-tanc (m)	1,5	Volum útil cubeta(m ³)	24

Taula 11.4. Dimensions dels tancs i de la cubeta de l'àcid sulfúric.

Dimensions tanc		Dimensions cubeta	
Diàmetre tanc (m)	1,5	Amplada (m)	6,5
Alçada tanc (m)	2,5	Allargada (m)	6,5
Nº tancs	1	Alçada (m)	0,15
Volum tanc (m ³)	5	Area total ocupada (m ²)	42,25
Distància tanc-paret (m)	1	Area útil cubeta(m ²)	42,25
Distància tanc-tanc (m)	1,5	Volum útil cubeta(m ³)	6

Taula 11.5. Dimensions dels tancs i de la cubeta de l'anhídrid acètic.

Dimensions tanc		Dimensions cubeta	
Diàmetre tanc (m)	2,5	Amplada (m)	8
Alçada tanc (m)	4,5	Allargada (m)	12,5
Nº tancs	4	Alçada (m)	0,22
Volum tanc (m ³)	20	Area total ocupada (m ²)	100
Distància tanc-paret (m)	1	Area útil cubeta(m ²)	85,3
Distància tanc-tanc (m)	1,5	Volum útil cubeta(m ³)	24

Taula 11.6. Dimensions dels tancs i de la cubeta de l'fenol.

Dimensions tanc		Dimensions cubeta	
Diàmetre tanc (m)	2,5	Amplada (m)	8
Alçada tanc (m)	4,5	Allargada (m)	12,5
Nº tancs	4	Alçada (m)	0,22
Volum tanc (m ³)	20	Area total ocupada (m ²)	100
Distància tanc-paret (m)	1	Area útil cubeta(m ²)	85,3
Distància tanc-tanc (m)	1	Volum útil cubeta(m ³)	24

11.3. DISSENY DE LES SITGES D'EMMAGATZEMATGE DE SÒLIDS

De les matèries primes que presenta el projecte no hi ha cap que arribi dels proveïdors de forma sòlida, donat que la més susceptible a arribar en sòlid és el fenol, però al resultar ser una pols explosiva és convenient rebre-la en el seu estat líquid a la temperatura de fusió (40°C). En canvi el producte final (paracetamol), després de passar pel procés de purificació s'obté en estat sòlid, susceptible de ser emmagatzemat en sitges. A més es té un subproducte per a la venda: orto-nitrofenol, que també s'emmagatzemarà en la seva forma sòlida.

A continuació es presenten els càlculs emprats pel disseny de les tolves, per l'emmagatzematge de paracetamol. La producció de paracetamol diària és de 21870 Kg, de manera que es calcularà una tolva capaç d'emmagatzemar aquesta quantitat. A partir de la tolva es prepararan les bosses de 25 kg dins d'un bidó de cartró, que es portaran a venda.

11.3.1. Sitges d'emmagatzematge de paracetamol

11.3.1.1. Dimensions de la sitja

- Volum de paracetamol a emmagatzemar

$$21870 \text{ kg paracetamol} \frac{1 \text{ m}^3}{1250 \text{ kg paracetamol}} = 17,5 \text{ m}^3 \text{ paracetamol}$$

- Càlcul del diàmetre de la sitja

$$V \text{ tolva} = V \text{ cilindre} + V \text{ con} = \frac{\pi}{4} \cdot De^2 + \frac{\pi}{12} \cdot De^2 \cdot L$$

$$L = \frac{De}{2 \cdot \tan \alpha}$$

Es considera un angle α de 45° , de manera que s'obté un diàmetre:

$$De = \left(\frac{V}{\left(\frac{1,5}{4} \pi\right) + \left(\frac{\pi}{24 \cdot \tan \alpha}\right)} \right)^{1/2} = \left(\frac{17,5 \text{ m}^3}{\left(\frac{1,5}{4} \pi\right) + \left(\frac{\pi}{24 \cdot \tan 45}\right)} \right)^{1/2} = 3,65$$

- Càlcul de l'altura del cilindre

$$\text{Altura cilindre} = 1,5 \cdot De = 5,47 \text{ m}$$

- Càlcul de l'altura del fons cònic

$$\text{Altura con (L)} = \frac{De}{2 \cdot \tan 45} = 1,825 \text{ m}$$

- Càlcul de l'altura total de la sitja

$$\text{Altura sitja} = \text{Altura cilindre} + \text{Altura con} = 7,3 \text{ m}$$

11.3.1.2. Disseny mecànic

- Superfície del cilindre:

$$\text{Superfície cilindre} = \pi \cdot De \cdot \text{Altura cilindre} = 62,72 \text{ m}^2$$

- Càlcul del volum d'acer del cilindre:

Es considera un espessor de 0,005 m.

$$\text{Volum acer cilindre} = \text{Superfície cilindre} \cdot 0,005 = 0,313 \text{ m}^3$$

- Càlcul superfície fons cònic:

$$\text{Superfície con} = \pi \frac{De}{2} \cdot \left(\frac{De^2}{4} + L^2 \right)^{1/2} = \pi \frac{3,65}{2} \cdot \left(\frac{3,65^2}{4} + 1,825^2 \right)^{1/2} = 14,8 \text{ m}^2$$

- Càlcul del volum d'acer del fons cònic:

Es considera un espessor de 0,005 m.

$$\text{Volum acer con} = \text{Superfície con} \cdot 0,1 = 14,8 \cdot 0,005 = 0,074 \text{ m}^3$$

- Càlcul del volum total d'acer:

$$\begin{aligned} \text{Volum total} &= \text{Volum acer cilindre} + \text{Volum acer fons} = 0,074 \text{ m}^3 + 0,313 \text{ m}^3 \\ &= 0,387 \text{ m}^3 \end{aligned}$$

- Pes sitja buida:

$$\text{Pes sitge buida} = \text{Volum total} \cdot \text{densitat acer} = 0,387 \text{ m}^3 \cdot 7860 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} = 3041,82 \text{ Kg}$$

- Càlcul del pes de la sitja plena d'aigua

$$Pe_{sitja \text{ amb aigua}} = P_{sitge \text{ buida}} + \rho_{acer}(V_{sitge \text{ total}})$$

$$Pe_{sitja \text{ amb aigua}} = 3041,82 \text{ Kg} + 1000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} (17,5 \text{ m}^3) = 20541,82 \text{ Kg}$$

- Càlcul del pes de la sitja plena de sòlid a emmagatzemar

$$Pe_{sitja \text{ amb paracetamol}} = 3041,82 \text{ Kg} + 1250 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} (17,5 \text{ m}^3) = 24916,82 \text{ Kg}$$

11.3.2. Sitges d'emmagatzematge de l'orto-nitrofenol

11.3.2.1. Dimensions de la sitja

- Volum d'orto-nitrofenol a emmagatzemar:

$$817,82 \frac{kg \text{ orto}}{batch} \frac{6 \text{ batch}}{dia} \frac{1 m^3}{1050 kg} = 4,67 m^3 \text{ ortonitrofenol}$$

- Càlcul del diàmetre de la sitja

$$De = \left(\frac{V}{\left(\frac{1,5}{4} \pi\right) + \left(\frac{\pi}{24 \cdot \tan \alpha}\right)} \right)^{1/2} = \left(\frac{4,67 m^3}{\left(\frac{1,5}{4} \pi\right) + \left(\frac{\pi}{24 \cdot \tan 45}\right)} \right)^{1/2} = 1,88 m^3$$

- Càlcul de l'altura del cilindre

$$\text{Altura cilindre} = 1,5 \cdot De = 2,83 m$$

- Càlcul de l'altura del fons cònic

$$\text{Altura con (L)} = \frac{1,88}{2 \cdot \tan 45} = 0,94 m$$

- Càlcul de l'altura total de la sitja

$$\text{Altura sitja} = \text{Altura cilindre} + \text{Altura con} = 3,77 m$$

11.3.2.2. Disseny mecànic

- Superfície del cilindre:

$$\text{Superfície cilindre} = \pi \cdot De \cdot \text{Altura cilindre} = 16,7 \text{ m}^2$$

- Càlcul del volum d'acer del cilindre:

Es considera un espessor de 0,01 m.

$$\text{Volum acer cilindre} = \text{Superfície cilindre} \cdot 0,005 = 0,0835 \text{ m}^3$$

- Càlcul superfície fons cònic:

$$\text{Superfície con} = \pi \frac{De}{2} \cdot \left(\frac{De^2}{4} + L^2 \right)^{1/2} = \pi \frac{1,88}{2} \cdot \left(\frac{1,88^2}{4} + 0,94^2 \right)^{1/2} = 3,92 \text{ m}^2$$

- Càlcul del volum d'acer del fons cònic:

Es considera un espessor de 0,1 m.

$$\text{Volum acer con} = \text{Superfície con} \cdot 0,1 = 3,92 \cdot 0,005 = 0,0196 \text{ m}^3$$

- Càlcul del volum total d'acer:

$$\begin{aligned} \text{Volum total} &= \text{Volum acer cilindre} + \text{Volum acer fons} = 0,083 \text{ m}^3 + 0,0196 \text{ m}^3 \\ &= 0,10 \text{ m}^3 \end{aligned}$$

- Pes sitja buida:

$$\text{Pes sitge buida} = \text{Volum total} \cdot \text{densitat acer} = 0,10 \text{ m}^3 \cdot 7860 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} = 786 \text{ Kg}$$

- Càlcul del pes de la sitja plena d'aigua

$$Pe_{sitja \text{ amb aigua}} = P_{sitja \text{ buida}} + \rho_{acer}(V_{sitja \text{ total}})$$

$$Pe_{sitja \text{ amb aigua}} = 786 \text{ Kg} + 1000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} (4,67 \text{ m}^3) = 5456 \text{ Kg}$$

- Càlcul del pes de la sitja plena de sòlid a emmagatzemar

$$Pe_{sitja \text{ amb fenol}} = 786 \text{ Kg} + 1050 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} (4,67 \text{ m}^3) = 5689,5 \text{ Kg}$$

11. 4. TANCs INTERMEDIS D'EMMAGATZEMATGE

11.4.1. Tancs intermedis per a diferents productes

En aquest apartat es dissenyen els tancs intermedis presents a planta necessaris per passar d'operar en continu a discontinu, i viceversa.

Al procés hi ha diferents tancs intermedis per diferents productes: àcid nítric (al 68%), àcid sulfúric (al 98%) ,i àcid acètic (al 33%).

El disseny dels tancs es realitza de la mateixa manera que s'han dissenyat els tancs d'emmagatzematge del parc de tancs.

A continuació es mostra un exemple de càlcul pel tanc intermedi d'emmagatzematge d'àcid nítric, provinent de la sortida per caps de la primera torre de destil·lació.

- Càlcul del volum del tanc

Cabal d'àcid d'entrada al tanc: 241 kg/h

Densitat de l'àcid: 1500 kg/m³

Cabal volumètric d'entrada:

$$241 \frac{kg}{h} \cdot \frac{1 m^3}{1500 kg} = \frac{0,16 m^3}{h} \text{ nítric entrada}$$

Temps de residència en el tanc: es suposa un temps suficient per emmagatzemar un batch: 4 hores.

Volum a emmagatzemar:

$$0,16 \frac{m^3}{h} \cdot 4 \text{ hores} = 0,64 m^3 \text{ nítric}$$

Es sobredimensionarà el tanc en un 30 %, de manera que el volum necessari passa a ser de:

$$Volum \text{ tanc intermig nítric} = 0,64 m^3 + (0,3 \cdot 0,64) = 0,83 m^3$$

Es decideix col·locar un tanc estàndard intermedi de nítric de $1 m^3$.

- Dimensionament del tanc

Les consideracions de disseny són:

- Gruix xapa cilindre = 4 mm
- Tipus de sostre = Toriesfèric
- Tipus de fons: Pla
- Càlcul del diàmetre del tanc:

$$De = \left(\frac{Volum \text{ fons superior} + Volum \text{ cilindre}}{\left(\frac{1,5}{4}\pi\right) + \left(\frac{1}{12}\pi\right)} \right)^{1/3} = \left(\frac{0,83 m^3}{\left(\frac{1,5}{4}\pi\right) + \left(\frac{1}{12}\pi\right)} \right)^{1/3}$$

$$= 0,83 m$$

- Càlcul de l'altura del tanc:

$$Altura \text{ cilindre} = 1,5 \cdot De = 1,5 \cdot 0,83 m = 1,25 \text{ metres}$$

- Altura fons toriesfèric:

$$Altura fons = (0,2 \cdot De) + (1,5 \cdot e) = (0,2 \cdot 0,83) + (1,5 \cdot 0,004) = 0,172 \text{ metres}$$

- Volum cilindre:

$$Volum cilindre = \pi \cdot 0,415^2 \cdot 1,25 \text{ m} = 0,676 \text{ m}^3$$

- Volum fons toriesfèric:

$$Volum fons = 0,1 \cdot (0,83 - 2 \cdot 0,004) = 0,082 \text{ m}^3$$

Amb les dimensions del tanc es passa a realitzar el càlcul dels pesos:

- Volum acer al cilindre:

$$\begin{aligned} Volum acer cilindre &= \pi \cdot De \cdot Altura \cdot espessor = \pi \cdot 0,83 \cdot 1,25 \cdot 0,004 \\ &= 0,013 \text{ m}^3 \end{aligned}$$

- Pes acer al cilindre:

$$\begin{aligned} Pes acer cilindre &= Volum acer cilindre \cdot densitat acer = 0,013 \cdot 7860 \\ &= 102,2 \text{ Kg} \end{aligned}$$

- Volum acer fons toriesfèric:

$$Sup fons = \frac{\pi}{2} \cdot Dp^2 + De \cdot (De - 2 \cdot Dp)$$

$$\text{On } Dp = 2 \cdot 0,1 \cdot De = 2 \cdot 0,1 \cdot 0,83 = 0,166 \text{ m}$$

$$Sup fons = \frac{\pi}{2} \cdot 0,166^2 + 0,83 \cdot (0,83 - 2 \cdot 0,166) = 0,45 \text{ m}^2$$

$$Volum d'acer al fons = Sup fons \cdot espessor fons = 0,45 \cdot 0,004 = 0,0018 \text{ m}^3$$

- Pes acer fons toriesfèric:

$$Pes\ fons = Volum\ acer\ fons \cdot densitat\ acer = 0,0018 \cdot 7860 = 14,3\ Kg$$

- Pes total del tanc pulmó buit :

$$Pes\ total = Pes\ acer\ cilindre + Pes\ acer\ fons = 102,2 + 14,3 = 116,5\ Kg$$

- Pes del tanc intermedi de nítric amb aigua:

$$Pes_{tanc} = P_{tanc\ buit} + \rho_{acer}(V_{tanc\ total})$$

$$Pes_{tanc\ pulmó} = 116,5\ Kg + 1000\ \frac{kg}{m^3}(1\ m^3) = 1116,5\ Kg$$

- Pes del tanc amb nítric:

Procedint d'igual forma que pel càlcul del pes del mesclador ple d'aigua:

$$Pes_{mesclador\ en\ operació} = P_{mesclador\ buit} + \rho_{mescla}(V_{mesclador\ total})$$

$$Pes_{mesclador\ en\ operació} = 116,5\ Kg + 1500\ \frac{Kg}{m^3}(1\ m^3) = 1616,5\ Kg$$

Taula 11.7. Resum dels paràmetres necessaris pel disseny dels tancs intermedis.

	T-304	T-302	T-303	T-601
Cabal volumètric (m ³ /h)	0,16	0,67	1,154	0,68
Temps retenció (h)	4	4	4	4
Volum tanc (m ³)	0,63	2,68	4,6	2,72
Volum sobredimensionat (m ³)	0,83	3,4	6	3,5
Volum real (m ³)	1	3,5	6	3,5
Gruix xapa (mm)	4	4	4	4
Tipus sostre	Toriesfèric	Toriesfèric	Toriesfèric	Toriesfèric
Tipus fons	Pla	Pla	Pla	Pla
Diàmetre tanc (m)	0,88	1,4	1,6	1,4

	T-304	T-302	T-303	T-601
Altura tanc (m)	1,51	2	2,75	2
Pes tanc buit (kg)	132,5	305,5	437,6	305,5
Pes tanc amb aigua (kg)	1132,5	3805,5	6437,6	3805,5
Pes tanc en operació (kg)	1632,5	6759,5	6437,6	6759,5

11.4.2. Tancs d'emmagatzematge previs a cristal·litzadors

Aquests tancs són els encarregats d'emmagatzemar el líquid provinent de la torre d'arrossegament amb vapor V-403 i de la columna de destil·lació S-601, ja que aquestes operacions treballen en continu, mentre que els cristal·litzadors ho fan de forma discontinua.

Els equips previs carreguen el producte als tancs d'emmagatzematge T-401, T-402, T-602, que hauran de disposar d'un volum de càrrega superior als cristal·litzadors, per tal de tenir en compte el temps de càrrega i descàrrega d'aquests.

- Capacitat del tanc T-401 i T-402:

La capacitat del cristal·litzador posterior, Z-401 i Z-403 és de 12 m^3 . Aquest volum es sobredimensionarà en un 30%, per tal d'evitar un vessament del tanc, de manera que:

$$\text{Volum tancs} = 12 \text{ m}^3 + (0,3 \cdot 12) = 15,6 \text{ m}^3$$

- Capacitat del tanc T-602

La capacitat del cristal·litzador posterior, Z-603 és de $0,3 \text{ m}^3$. Aquest volum es sobredimensionarà en un 30%, per tal d'evitar un vessament del tanc, de manera que:

$$\text{Volum tancs} = 0,3 \text{ m}^3 + (0,3 \cdot 0,3) = 0,4 \text{ m}^3$$

Amb les dades de capacitat dels tancs es passa a obtenir, de la mateixa manera que amb la resta dels tancs d'emmagatzematge, el seu dimensionament. Els resultats es presenten a la taula 11.8.

Taula 11.8. Paràmetres necessaris per al disseny dels tancs intermedis prevists a cristallitzadors.

	T-401	T-402	T-602
Temps retenció (h)	4	4	4
Volum tanc (m ³)	16	0,4	0,4
Gruix xapa (mm)	4	4	4
Tipus sostre	Toriesfèric	Toriesfèric	Toriesfèric
Tipus fons	Pla	Pla	Pla
Diàmetre tanc (m)	2,25	2,25	0,65
Altura tanc (m)	3,8	3,8	1,11
Pes tanc buit (kg)	841,53	841,53	71,95
Pes tanc amb aigua (kg)	16841,53	16841,53	471,95
Pes tanc en operació (kg)	17241,53	17241,53	481,95

11.5. MESCLADORS

El procés presenta diferents mescladors. Un d'ells compleix la funció de diluir el fenol que es rep a planta (al parc de tancs) amb aigua fins aconseguir la concentració desitjada per tal de poder emprar-ho en el procés. La resta són tancs mescladors dins del procés, tant de dilució amb aigua, com de mescla de productes provinents de la purificació, per dur a terme la recirculació.

11.5.1. Tanc de dilució de para-nitrofenol amb aigua

- Característiques del procés

A continuació es presenta un exemple de càlcul per un dels tancs mescladors que incorpora el procés.

Les seves corrents d'entrada són:

Component	Mesclador M-301 (kg/h)
Para-nitrofenol	863,75
Orto-nitrofenol	202
Di-nitrofenol	14,25
Aigua procés	432,75
Aigua necessària per dilució	1919,5

On els paràmetres a tenir en compte són:

Temperatura = 90°C

Densitat = 1050 kg/m³

Viscositat = 1 cP

- Càlcul de les dimensions del mesclador

2) Càlcul d'el volum

Per tal de calcular el volum necessari, sabent el cabal total d'entrada al mesclador, s'ha de fixar un temps de residència de cada mesclador. En aquest projecte es suposarà un temps de residència, pel mesclador que s'encarrega de la dilució de para-nitrofenol amb aigua, de 5 minuts.

$$V_{real} = \frac{\tau}{Ql}$$

Caldrà, però, sobredimensionar el volum dels tancs. Es considera que el volum necessari correspon al 75 % del volum real.

$$V_{sobredimensionat} = V_{real} \cdot \frac{100}{75}$$

b) Càlcul d'el diàmetre

Els tancs de dilució, de la mateixa manera que els reactors, estan formats per un cos cilíndric, més un fons superior i un fons inferior toricsfèrics.

$$D = \sqrt[3]{\frac{V}{\frac{\pi}{4} \cdot 1,5 + \frac{\pi}{12}}}$$

c) Càlcul d'el l'altura

Es considera la relació típica d'altura-diàmetre, també aplicada al càlcul dels reactors.

$$H = 1,5 \cdot D$$

d) Altres càlculs

Es considera que els tancs presenten fons toricsfèric, de forma que a més de l'alçada i el diàmetre, seran necessàries altres dimensions per completar el seu disseny:

A continuació es mostren les diferents dimensions calculades per a cada mesclador:

$$\text{Diàmetre exter} = \text{Diametre intern} + 2 \cdot \text{espessor}$$

$$F = 0,2 \cdot \text{diàmetre extern}$$

$$\text{Capacitat fons} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{int}}^2 \cdot \text{altura fons}$$

$$\text{Altura cilindre} = \text{Altura total} - (2 \cdot \text{altura fons})$$

$$\text{Superfície externa} = \pi \cdot D_{\text{ext}} \cdot H + \frac{\pi}{8} \cdot D_{\text{ext}}^2$$

$$\text{Superfície interna} = \pi \cdot D_{\text{int}} \cdot H + \frac{\pi}{8} \cdot D_{\text{int}}^2$$

Taula 11.9. *Resum de les dimensions de M-301.*

Volum real (m ³)	1,49
Volum sobredimensionat (m ³)	1,93
Diàmetre intern (m)	1,1
Altura (m)	1,88
Diàmetre extern (m)	1,11
Factor F	2,22
Altura fons (m)	0,221
Altura cilindre (m)	1,65
Volum cilindre (m ³)	2,86
Volum fons (m ²)	0,109
Espessor paret (m)	0,005

- Càlcul de l'agitador

Al mesclador serà important disposar d'una bona agitació, per tal de garantir la dissolució desitjada. En el mesclador es dissol el para-nitrofenol en aigua. Tot i que la solubilitat del producte és suficientment gran en el dissolvent, serà necessària una agitació moderada.

Per tal de realitzar una bona elecció i disseny de l'agitador serà necessari tenir en compte les característiques del procés, tant les de la mescla a agitar, com la finalitat de l'agitació.

Les característiques per al disseny de l'agitador s'obté de la bibliografia (Perry's, 1999):

Model de flux	Radial /Axial
Viscositat fluid	Fins a 20 cp
Velocitat tangencial del fluid	9 m/s
Régim	Turbulent
Geometria del fons	Toriesfèric
Tipus de pales	Planes inclinades.

Donat que l'agitador presenta una geometria centrada al seu centre, es necessitarà instal·lar una sèrie de bafles, que evitaran l'aparició de vòrtex. El número de bafles que es col·locarà en el mesclador del procés seran 2, suficients per reduir el vòrtex, ja que l'agitació necessària no serà extremadament alta.

A continuació es mostra les relacions de dimensions per un agitador de pales inclinades, segons les diferents parts que presenta: agitador i bafles.

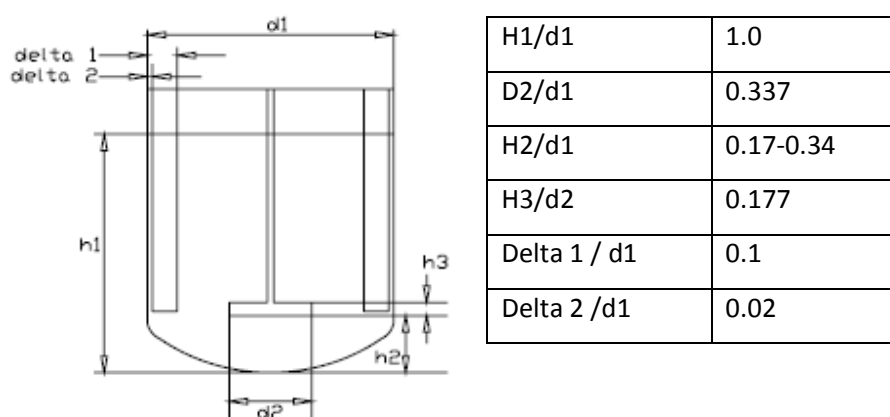


Figura 1. Dimensions de l'agitador i dels bafles.

Donat que anteriorment s'ha calculat el diàmetre intern que ha de presentar el tanc de mescla, és possible obtenir el valor de les diferents distàncies.

Distàncies agitació (m)	Mesclador M-301
D1	1,1
D2	0,370
H1	1,1
H2	0,275
H3	0,065
Delta 1	0,11
Delta 2	0,022

Càlcul de la potència de l'agitador:

Dins del disseny de l'agitador és important conèixer la potència necessària per disposar de l'agitació requerida, la qual ve definida per la següent fórmula:

$$P = N_p \cdot N^3 \cdot d_2^5 \cdot \rho$$

On: P: Potència necessària per l'agitador (W)

N_p : Número de potència

d_2 : Diàmetre de l'agitador (m)

N: revolucions de l'agitador (rps)

ρ : densitat del fluid (Kg/m^3)

Per tal d'obtenir el número de potència s'utilitza l'equació de Reynolds:

$$Re = \frac{N \cdot d_2^2 \cdot \rho_A}{\mu_A}$$

On: μ = Viscositat del fluid ($\text{kg/m}\cdot\text{s}$)

$N = 2$ rps

La viscositat de la mescla (aigua-para-nitrofenol) és d' aproximadament $1,5 \cdot 10^{-4}$ kg/ms i la seva densitat és de 1050 Kg/m^3 . Amb aquestes dades es calcula el Reynolds:

$$Re = \frac{2 \cdot 0,37^2 \cdot 1050}{1,5 \cdot 10^{-4}} = 1916600$$

Amb el valor del Reynolds es passa a mirar la gràfica que el relaciona amb el nombre de potència, per a l'agitador desitjat (corba 1, $w/D=1/5$). En aquest cas amb un Reynolds de 1916600 s'obté un valor $N_p=5$.

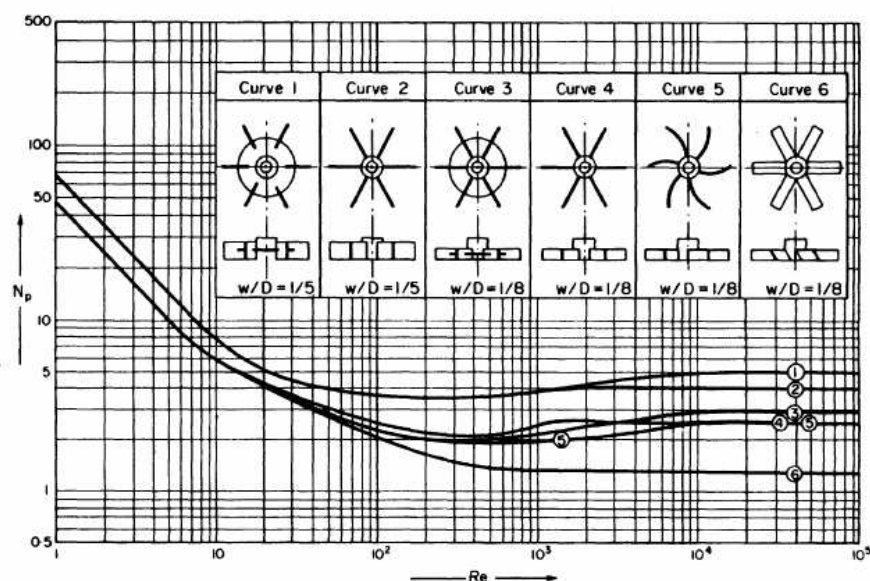


Figura 2. Gràfic del nombre de potència en funció del nombre de Reynolds per a diferents tipus d'agitadors.

Amb el nombre de potència es calcula la potència necessària per a l'agitador:

$$P = 5 \cdot 2^3 \cdot (0,37)^5 \cdot 1050 = 291,2 \text{ W} = 0,29 \text{ kW}$$

Per tal d'analitzar aquesta potència de forma qualitativa es passa a dividir el valor entre el volum del mesclador. Així:

$$\frac{\text{Potència agitador}}{\text{Volum del mesclador}} = \frac{0,29 \text{ kW}}{1,49 \text{ m}^3} = 0,19 \text{ kW/m}^3$$

A continuació es resumeixen les dimensions de l'agitador.

Diàmetre impulsor (m)	0,37
N = velocitat de rotació (rps)	2
Reynolds	1916600
Np= número de potència	5
Potència (kW)	0,29
Potència (kW/m ³)	0,19

Aquests valors de potència corresponen a una agitació moderada, segons la taula 10.14:

Table 10.14. Power requirements — baffled agitated tanks

Agitation	Applications	Power, kW/m ³
Mild	Blending, mixing	0.04–0.10
	Homogeneous reactions	0.01–0.03
Medium	Heat transfer	0.03–1.0
	Liquid-liquid mixing	1.0–1.5
Severe	Slurry suspension	1.5–2.0
	Gas absorption,	1.5–2.0
	Emulsions	1.5–2.0
Violent	Fine slurry suspension	>2.0

Així doncs, es considera que l'agitació dissenyada és suficient pel sistema que es disposa.

Càlcul del volum de l'agitador:

Per calcular el volum de l'agitador s'utilitzen les següents equacions de la bibliografia:

$$V_{agitador} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{pales}^2 \cdot H_{pales} + \frac{\pi}{4} \cdot D_{tub}^2 \cdot H_{tub}$$

$$H_{tub} = H_{total} - H_{fons pales}$$

Les dades necessàries pel càlcul de l'agitador es presenten són:

Diàmetre tub (m)	0,05
Altura tub (m)	1
Diàmetre pales (m)	0,37
Altura pales (m)	0,065

$$V_{agitador} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{pales}^2 \cdot H_{pales} + \frac{\pi}{4} \cdot D_{tub}^2 \cdot H_{tub}$$

$$V_{agitador} = \frac{\pi}{4} \cdot 0,37^2 \cdot 0,065 + \frac{\pi}{4} \cdot 0,05^2 \cdot 1 = 0,00895 \text{ m}^3$$

Càlcul de les pantalles deflectores:

En aquest apartat es calcula les pantalles deflectores necessàries per a una bona mescla.

Pel càlcul serà necessari conèixer l'espai entre pantalles (lb), segons l'equació:

$$lb = 0,3 \cdot D_{mesclador}$$

$$N^{\circ} \text{ pantalles deflectores} = \frac{L}{lb} - 1$$

Donat que el diàmetre del mesclador és: 0,37 m, l'espai entre pantalles serà:

$$lb = 0,3 \cdot 0,37 = 0,111$$

$$N^{\circ} \text{ pantalles deflectores} = \frac{0,37}{0,111} - 1 = 2 \text{ pantalles}$$

-Càlcul de l'aïllament del mesclador:

En aquest cas el mesclador portarà un cert aïllament, donat que la dilució es realitza amb aigua a 90°C per augmentar la solubilitat del para-nitrofenol. El material es fibra de vidre, recobert per una capa d'alumini, contra les adversitats exteriors. Pel càlcul de l'aïllament:

$$x = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{\Delta T}{De}\right)^{1/4}}$$

On: ΔT = increment de temperatura entre interior (40°C) i exterior (25°C)

De: diàmetre extern tanc

X: gruix aïllament (cm)

$$x = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{90 - 25}{0,35}\right)^{1/4}} = 2,25 \text{ cm}$$

Per un aïllament prou segur es sobredimensiona entre un 30 i 50%.

Gruix exacte aïllament = 2,25 cm

Gruix sobredimensionat = 3,15 cm

Gruix real = 3,5 cm

-Càlcul dels pesos:

A continuació es mostren les equacions necessàries pels càlculs dels pesos del mesclador:

*Càlcul del pes de l'acer: $Pes_{acer} = Volum_{acer} \cdot \rho_{acer}$

$$Pes_{acer} = 0,029 \, m^3 \cdot 7860 \, \frac{Kg}{m^3} = 230,29 \, Kg$$

*Càlcul del pes de l'agitador: $Pes_{agitador} = V_{agitador} \cdot \rho_{agitador}$

$$Pes_{agitador} = 0,0089 \, m^3 \cdot 7860 \, \frac{Kg}{m^3} = 69,9 \, Kg$$

*Pes total del mesclador buit: $Pes_{mesclador \, buit} = 1,1 \cdot P_{acer} + P_{agitador}$

$$Pes_{mesclador \, buit} = 1,1 \cdot 230,29 \, Kg + 69,9 \, Kg = 323,27 \, Kg$$

Es suposa un 10 % d'increment del pes, per contemplar els diferents accessoris que pugui presentar el mesclador.

*Pes del mesclador ple d'aigua:

El pes del mesclador ple d'aigua es calcula segons la fórmula:

$$Pes_{mesclador \, amb \, aigua} = P_{mesclador \, buit} + \rho_{aigua}(V_{mesclador \, total} - V_{agitador})$$

$$Pes_{mesclador \, amb \, aigua} = 323,27 \, Kg + 1000 \, \frac{kg}{m^3}(1 \, m^3 - 0,0089 \, m^3) = 1314,4 \, Kg$$

*Pes mesclador en operació:

Procedint de la mateixa manera que pel càlcul del pes del mesclador ple d'aigua:

$$Pes_{mesclador\ en\ operació} = P_{mesclador\ buit} + \rho_{mescla} (V_{mesclador\ total} - V_{agitador})$$

$$Pes_{mesclador\ en\ operació} = 323,27\ Kg + 1050\ \frac{Kg}{m^3} (1\ m^3 - 0,0089\ m^3) = 1363,9Kg$$

11.5.2. Tanc d'addició d'etanol

El tanc M-501 és l'encarregat d'afegir l'etanol necessari per tal de poder retornar al reactor d'hidrogenació la concentració adequada d'etanol amb aigua. La corrent d'entrada al tanc prové de la sortida de la torre de destil·lació S-501.

Component	Mesclador M-501 (kg/h)
Etanol	5137,1
Aigua	363,43
Addició etanol	754,6
Addició aigua	45,27
Total	6300,4

Les propietats del fluid d'entrada al M-501 són:

Paràmetres	Mesclador M-501
Temperatura (°C)	70
Densitat (kg/m ³)	801,9
Viscositat (N/m)	$1,63 \cdot 10^{-3}$
Cp (kJ/kg °C)	2,44

Amb aquestes dades es procedeix al càlcul de les dimensions del mesclador, obtenint:

Mesclador M-501	
Volum real (m ³)	7,85
Volum sobredimensionat (m ³)	9,8
Diàmetre intern (m)	1,89
Altura (m)	3,23
Diàmetre extern (m)	1,9
Factor F	3,8
Altura fons (m)	0,38
Altura cilindre (m)	2,84
Volum cilindre (m ³)	8,4
Volum fons (m ²)	0,18
Espessor paret (m)	0,005

- Càlcul de l'agitador

Les dimensions de l'agitador calculades d'acord amb les relacions geomètriques de la figura 1 són:

Distàncies (m)	Mesclador
D1	1,89
D2	0,637
H1	1,89
H2	0,378
H3	0,113
Delta 1	0,189
Delta 2	0,038

Càlcul de la potència de l'agitador:

$$P = Np \cdot N^3 \cdot d_2^5 \cdot \rho$$

Per tal d'obtenir el número de potència s'utilitza l'equació de Reynolds:

$$Re = \frac{N \cdot d_2^2 \cdot \rho_A}{\mu_A}$$

On: μ = Viscositat del fluid (kg/m·s) ; $N = 2$ rps

La viscositat de la mescla (etanol-aigua) és d'aproximadament $1,63 \cdot 10^{-3}$ kg/ms i la seva densitat es de $801,9 \text{ Kg/m}^3$. Amb aquestes dades es calcula el Reynolds:

$$Re = \frac{2 \cdot 0,637^2 \cdot 801,9}{1,63 \cdot 10^{-3}} = 399246$$

$$P = 5 \cdot 2^3 \cdot (0,673)^5 \cdot 801,9 = 4428,5 \text{ W} = 4,43 \text{ kW}$$

Per tal d'analitzar aquesta potència de forma qualitativa es passa a dividir el valor entre el volum del mesclador.

$$\frac{\text{Potència agitador}}{\text{Volum del mesclador}} = \frac{4,43 \text{ kW}}{7,85 \text{ m}^3} = 0,56 \text{ kW/m}^3$$

Així doncs, segons la taula 10.14 es considera que l'agitació dissenyada és suficient pel sistema que es disposa

Càlcul d'el volum d'el agitador:

$$V_{agitador} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{pales}^2 \cdot H_{pales} + \frac{\pi}{4} \cdot D_{tub}^2 \cdot H_{tub}$$

$$H_{tub} = H_{total} - H_{fons pales}$$

On:

Diàmetre tub (m)	0,05
Altura tub (m)	1,69
Diàmetre pales (m)	0,637
Altura pales (m)	0,113

$$V_{agitador} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{pales}^2 \cdot H_{pales} + \frac{\pi}{4} \cdot D_{tub}^2 \cdot H_{tub}$$

$$V_{agitador} = \frac{\pi}{4} \cdot 0,637^2 \cdot 0,113 + \frac{\pi}{4} \cdot 0,05^2 \cdot 1,69 = 0,039 \text{ m}^3$$

Càlcul de l'espai entre pantalles deflector:

$$lb = 0,3 \cdot D_{\text{mesclador}}$$

$$N^{\circ} \text{ pantalles deflectores} = \frac{L}{lb} - 1$$

Donat que el diàmetre del mesclador és: 0,637 m, l'espai entre pantalles serà:

$$lb = 0,3 \cdot 0,637 = 0,1911$$

$$N^{\circ} \text{ pantalles deflectores} = \frac{0,637}{0,1911} - 1 = 2 \text{ pantalles}$$

-Càlcul de l'aïllament del mesclador:

En aquest cas el mesclador portarà un cert aïllament, donat que la dilució es realitza amb aigua a 90°C, per augmentar la solubilitat del para-nitrofenol. El material és fibra de vidre, recobert per una capa d'alumini, contra les adversitats exteriors. Pel càlcul de l'aïllament:

$$x = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{\Delta T}{De}\right)^{1/4}}$$

On: ΔT = increment de temperatura entre interior (40°C) i exterior (25°C)

De: diàmetre extern tanc

X: gruix aïllament (cm)

$$x = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{90 - 25}{0,35}\right)^{1/4}} = 2,25 \text{ cm}$$

Per un aïllament prou segur es sobredimensiona entre un 30 i 50%. Així:

Gruix exacte aïllament = 2,25 cm

Gruix sobredimensionat = 3,15 cm

Gruix real = 3,5 cm

-Càlcul dels pesos:

*Càlcul del pes de l'acer: $Pes_{acer} = 0,0959 \text{ m}^3 \cdot 7860 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} = 753,7 \text{ Kg}$

*Càlcul del pes de l'agitador: $Pes_{agitador} = 0,039 \text{ m}^3 \cdot 7860 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} = 309 \text{ Kg}$

*Pes total del mesclador buit: $Pes_{mesclador \text{ buit}} = 1138,20 \text{ Kg}$

Es suposa un 10 % d'increment del pes, per contemplar els diferents accessoris que pugui presentar el mesclador.

*Pes del mesclador ple d'aigua:

$$Pes_{mesclador \text{ amb aigua}} = 1138,2 \text{ Kg} + 1000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} (9,8 \text{ m}^3 - 0,039 \text{ m}^3) = 10899,2 \text{ Kg}$$

*Pes mesclador en operació:

$$Pes_{mesclador \text{ en operació}} = 1138,2 \text{ Kg} + 801,9 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} (9,8 \text{ m}^3 - 0,039 \text{ m}^3) = 8965,4 \text{ Kg}$$

11.5.3. Tanc de dilució de fenol (parc de tancs)

En aquest cas el tanc mesclador presenta un funcionament diferent que els tancs que es troben a planta. No és un tanc en continu, sinó que la seva funció només és la de diluir el fenol que arriba al parc de tancs, fins a la concentració desitjada, amb aigua.

En realitat són tancs d'emmagatzematge amb agitació.

A continuació es presenta les necessitats d'aigua requerides, per una quantitat de fenol donada, en concret, un batch d'operació.

2927,3	kg fenol/batch
732	kg aigua d'addició/batch

El fenol arriba al parc de tancs tal i com el transporten els proveïdors: en el seu estat líquid, a 40°C, i una puresa del 99%. Es vol que la concentració de fenol que entra al reactor de nitració sigui del 80% en pes, de tal manera que es calcula l'aigua necessària per diluir el fenol d'un batch, coneixent els kilograms de fenol necessaris en la reacció:

$$2927,3 \text{ kg fenol} \cdot \frac{20 \text{ kg aigua}}{80 \text{ kg fenol}} = 731,8 = 732 \text{ kg aigua}$$

La planta realitza 6 batchos al dia, de manera que les necessitats diàries són:

17563,8	kg fenol/dia
4391	kg aigua d'addició/dia

Per tal d'obtenir el volum necessari per emmagatzemar el fenol i aigua d'addició necessaris en un dia d'operació es realitza el càlcul, segons les densitats:

$$17563,8 \text{ kg fenol} \cdot \frac{1 \text{ m}^3 \text{ fenol}}{1050 \text{ kg fenol}} = 16,72 \text{ m}^3 \text{ fenol}$$

$$4391 \text{ kg aigua} \cdot \frac{1 \text{ m}^3 \text{ aigua}}{1000 \text{ kg aigua}} = 4,391 \text{ m}^3 \text{ aigua}$$

$$\text{m}^3 \text{ tanc necessari} = 16,72 + 4,391 = 21,111 \text{ m}^3 \text{ tanc}$$

El volum de tanc es sobredimensiona un 30 %, per evitar que el tanc romangui buit en algun instant:

$$\text{m}^3 \text{ tanc sobredim} = 21,111 \text{ m}^3 \cdot (0,3 \cdot 21,111) = 27,44 \text{ m}^3$$

S'ha decidit col·locar 4 tancs de mescla de fenol al parc de tancs, per tal d'assegurar que s'arriba als requeriments de la planta, però cada dia de càrrega només s'ompliran 3 dels 4 tancs. El camió de càrrega subministrarà fenol als tancs cada dos dies.

Sabent el temps entre càrrega i càrrega dels tancs, el volum necessari es recalcula:

$$m^3 \text{ necessaris} = \frac{27,44 \text{ m}^3}{\text{dia}} \cdot 2 \text{ dies operació} = 54,88 \text{ m}^3$$

$$m^3 \text{ tanc} = \frac{54,88 \text{ m}^3}{3 \text{ tancs}} = 18,3 \text{ m}^3$$

Amb aquestes dades es decideix col·locar 4 tancs de 20 m^3 de dilució de fenol, on un d'ells romandrà sempre ple (i no sempre serà el mateix).

Els requeriments de cada tanc són:

$$18,3 \text{ m}^3 \text{ total} \cdot \frac{16,72 \text{ m}^3 \text{ fenol}}{21,111 \text{ m}^3 \text{ total}} = 14,49 = 14,5 \frac{\text{m}^3 \text{ fenol}}{\text{tanc}}$$

$$18,3 \text{ m}^3 \text{ total} \cdot \frac{4,391 \text{ m}^3 \text{ fenol}}{21,111 \text{ m}^3 \text{ total}} = 3,8 \frac{\text{m}^3 \text{ aigua}}{\text{tanc}}$$

La càrrega inicial de fenol als tancs requerirà 58 m^3 fenol i 15,2 m^3 aigua, per omplir els 4 tancs. Sabent que es gasten 21,111 m^3 totals al dia:

$$21,111 \frac{\text{m}^3}{\text{dia}} \cdot 2 \text{ dies} = 42,2 \text{ m}^3 \text{ consumits}$$

Això significa que cada 2 dies es buidaran 2 tancs del parc de tancs, i començarà a buidarse el tercer. De manera que el subministrador carregarà cada 2 dies els 2 tancs buits, mentre la producció continua amb els altres dos.

El volum necessari a subministrar pel proveïdor, cada 2 dies, serà:

$$18,3 \text{ m}^3 \text{ tanc} \cdot 2 \text{ tancs} = 36,6 \text{ m}^3 \text{ fenol}$$

- Càlcul dimensions dels tancs de dilució fenol

Es procedeix de la mateixa manera que s'ha realitzat pel dimensionament del mesclador.

Els resultats són els següents.

Mesclador fenol	
Volum sobredimensionat (m ³)	18,3
Diàmetre intern (m)	2,33
Altura (m)	4,5
Diàmetre extern (m)	2,5
Factor F	0,071
Altura part abombada (m)	0,51
Altura cilindre (m)	3,75
Superfície externa (m ²)	36,09
Superfície interna (m ²)	35,9
Capacitat fons torisfèric (m ³)	1,53
Espessor paret (m)	0,008

- Càlcul de l'agitador

La mescla del fenol amb l'aigua de dissolució es realitzarà en el moment en que es carregui el fenol al tanc, per tal d'evitar que quan el fenol es refredi a temperatura ambient, passi al seu estat sòlid, formant grànuls. A més, a aquesta temperatura (40°C) la viscositat de la mescla disminueix, facilitant l'agitació. Un cop realitzada la mescla, l'agitador deixarà d'actuar convertint el tanc en un tanc d'emmagatzematge simple, sense agitació.

Es calculen les dimensions de l'agitador mitjançant les relacions geomètriques de figura 1 obtenint:

Distàncies (m)	Mesclador TF-101/104
D1	2,5
D2	0,8425
H1	2,5
H2	0,625
H3	0,098
Delta 1	0,25
Delta 2	0,05

Càlcul de la potència de l'agitador:

$$P = Np \cdot N^3 \cdot d_2^5 \cdot \rho$$

$$Re = \frac{N \cdot d_2^2 \cdot \rho_A}{\mu_A}$$

On: μ = Viscositat del fluid (kg/m·s)

$$N = 2 \text{ rps}$$

La viscositat de la mescla (aigua-fenol) és d'aproximadament $1 \cdot 10^{-3}$ kg/ms i la seva densitat es de 1025 Kg/m³. Amb aquestes dades es calcula el Reynolds:

$$Re = \frac{2 \cdot 0,8425^2 \cdot 1025}{1 \cdot 10^{-3}} = 1455102$$

Amb el valor del Reynolds es passa a mirar la gràfica que el relaciona amb el nombre de potència, per a l'agitador desitjat. En aquest cas s'obté un valor $Np = 5$.

Amb el valor de potència es calcula la potència necessària per a l'agitador:

$$P = 5 \cdot 2^3 \cdot (0,8425)^5 \cdot 1050 = 17403 \text{ W} = 17,4 \text{ kW}$$

Per tal d'analitzar aquesta potència de forma qualitativa es passa a dividir el valor entre el volum del mesclador. Així:

$$\frac{\text{Potència agitador}}{\text{Volum del mesclador}} = \frac{17,4 \text{ kW}}{18,3 \text{ m}^3} = 0,95 \text{ kW/m}^3$$

Aquests valors de potència corresponen a una agitació mitjana, suficient per mesclar el fenol amb l'aigua.

Càlcul del volum de l'agitador:

$$V_{\text{agitador}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{pales}}^2 \cdot H_{\text{pales}} + \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{tub}}^2 \cdot H_{\text{tub}}$$

$$H_{\text{tub}} = H_{\text{total}} - H_{\text{fons pales}}$$

On:

Diàmetre tub (m)	0,05
Altura tub (m)	2,4
Diàmetre pales (m)	0,8425
Altura pales (m)	0,098

$$V_{agitador} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{pales}^2 \cdot H_{pales} + \frac{\pi}{4} \cdot D_{tub}^2 \cdot H_{tub}$$

$$V_{agitador} = \frac{\pi}{4} \cdot 0,8425^2 \cdot 0,098 + \frac{\pi}{4} \cdot 0,05^2 \cdot 2,4 = 0,059 \text{ m}^3 = 0,06 \text{ m}^3$$

Càlcul de les pantalles deflectores:

$$lb = 0,3 \cdot D_{mesclador}$$

$$N^{\circ} \text{ pantalles deflectores} = \frac{L}{lb} - 1$$

Donat que el diàmetre del mesclador és: 2,5 m, l'espai entre pantalles serà:

$$lb = 0,3 \cdot 2,5 = 0,75$$

$$N^{\circ} \text{ pantalles deflectores} = \frac{2,5}{0,75} - 1 = 2 \text{ pantalles}$$

- Càlcul de l'aïllament del mesclador:

En aquest cas el mesclador portarà un cert aïllament, ja que la temperatura a la que arriba el fenol és de 40°C. El material és fibra de vidre, recobert per una capa d'alumini, contra les adversitats exteriors. Pel càlcul de l'aïllament:

$$x = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{\Delta T}{De}\right)^{1/4}}$$

On: ΔT = increment de temperatura entre interior (40°C) i exterior (25°C)

De: diàmetre extern tanc

X: gruix aïllament (cm)

$$x = \frac{30}{3.6 \cdot \left(\frac{40 - 25}{2.5}\right)^{1/4}} = 5,32$$

Per un aïllament prou segur es sobredimensiona entre un 30 i 50%.

Gruix exacte aïllament = 5,32 cm

Gruix sobredimensionat = 7,4 cm

Gruix real = 7,5 cm

- Càlcul dels pesos:

A continuació es mostren les equacions necessàries pels càlculs dels pesos del mesclador:

*Càlcul del pes de l'acer:

$$Pes_{acer} = 2483 \text{ Kg}$$

*Càlcul del pes de l'agitador:

$$Pes_{agitador} = 471,6 \text{ Kg}$$

*Pes total del mesclador buit:

$$Pes_{mesclador \text{ buit}} = 3202 \text{ Kg}$$

Es suposa un 10 % d'increment del pes, per contemplar els diferents accessoris que pugui presentar el mesclador.

*Pes del mesclador ple d'aigua:

$$Pes_{mesclador\ amb\ aigua} = 23142\ Kg$$

*Pes mesclador en operació:

$$Pes_{mesclador\ en\ operació} = 23640\ Kg$$

11.6. TANCS PULMÓ

El procés presenta tres tancs pulmó encarregats de passar d'una producció en discontinu a una producció contínua, per tal de disminuir el volum dels equips necessaris.

Serà necessari que els tancs tinguin una capacitat suficient per tal de contenir un volum de líquid prou gran per poder contrarestar possibles fluctuacions en el cabal d'entrada, per tal que el de sortida romangui sempre constant, així com per facilitar el seguiment de la planta en cas d'una fallada de l'equip previ al tanc.

Es considerarà que els tancs pulmó tenen el volum suficient per emmagatzemar dos batchos d'operació, adequat per evitar problemes en cas d'aturada de la planta.

A continuació es mostrarà com a exemple el disseny d'un dels tancs pulmó, col·locat seguit d'un filtre premsa encarregat d'emmagatzemar la part líquida que s'obtingui.

El cabal que entrarà al tanc pulmó és de:

Component	Cabal (kg/h)
Aigua	356,5
Àcid sulfúric	1213,75
Àcid nítric	164
Total	1734,25

La densitat de la mescla és de 1750 kg/m^3 , així el cabal volumètric és aproximadament de $1\text{ m}^3/\text{h}$.

Amb aquestes dades es passa a calcular el volum del tanc pulmó necessari segons el temps de retenció del tanc. S'ha realitzat un estudi per diferents temps, per optimitzar la tria del millor model:

Temps retenció (min)	Volum Tanc (m ³)
2	0,033
6	0,1
8	0,133
12	0,2
15	0,25

Com s'observa el volum del tanc, en qualsevol cas, serà petit, ja que el cabal d'entrada també ho és. S'escollirà el volum del tanc per a un temps de 12 minuts, que es considerarà prou bo, amb un volum no massa petit.

El tanc a més es sobredimensionarà per evitar que mai romangui buit. El sobredimensionat es considera d'un 30%, de forma que el volum total final és:

$$Volum\ tanc\ sobredimensionat = 0,2 + (0,3 \cdot 0,2) = 0,26\ m^3$$

Amb aquests valors es passa a obtenir el disseny mecànic del tanc, amb les mateixes equacions utilitzades pel càlcul de les dimensions dels tancs d'emmagatzematge.

Les consideracions de disseny són:

- Gruix xapa cilindre = 4 mm
- Tipus de sostre = Toriesfèric
- Tipus de fons: Pla

- Càlcul del diàmetre del tanc:

$$De = \left(\frac{Volum\ fons\ superior + Volum\ cilindre}{\left(\frac{1,5}{4}\pi\right) + \left(\frac{1}{12}\pi\right)} \right)^{1/3} = \left(\frac{0,26\ m^3}{\left(\frac{1,5}{4}\pi\right) + \left(\frac{1}{12}\pi\right)} \right)^{1/3}$$

$$= 0,56\ m$$

- Càlcul de l'altura del tanc:

$$Altura\ cilindre = 1,5 \cdot De = 1,5 \cdot 0,56\ m = 0,84\ metres$$

- Altura fons toriesfèric:

$$Altura\ fons = (0,2 \cdot De) + (1,5 \cdot e) = (0,2 \cdot 0,56) + (1,5 \cdot 0,004) = 0,114\ metres$$

- Volum cilindre:

$$Volum\ cilindre = \pi \cdot 0,28^2 \cdot 0,84\ m = 0,206\ m^3$$

- Volum fons toriesfèric:

$$Volum\ fons = 0,1 \cdot (0,56 - 2 \cdot 0,004) = 0,055\ m^3$$

Amb les dimensions del tanc es passa a realitzar el càlcul dels pesos:

- Volum acer al cilindre:

$$Volum\ acer\ cilindre = \pi \cdot De \cdot Altura \cdot espessor = \pi \cdot 0,56 \cdot 0,84 \cdot 0,004$$

$$= 0,0060\ m^3$$

- Pes acer al cilindre:

$$Pes\ acer\ cilindre = Volum\ acer\ cilindre \cdot densitat\ acer = 0,0060 \cdot 7860$$

$$= 46,46\ Kg$$

- Volum acer fons toriesfèric:

$$Sup\ fons = \frac{\pi}{2} \cdot Dp^2 \cdot De + De \cdot (De - 2 \cdot Dp)$$

On $Dp = 2 \cdot 0,1 \cdot De = 2 \cdot 0,1 \cdot 0,56 = 0,112\ m$

$$Sup\ fons = \frac{\pi}{2} \cdot 0,112^2 \cdot 0,56 + 0,56 \cdot (0,56 - 2 \cdot 0,112) = 0,2078\ m^2$$

$$Volum\ d'acer\ al\ fons = Sup\ fons \cdot espessor\ fons = 0,2078 \cdot 0,004 = 0,00083\ m^3$$

- Pes acer fons toriesfèric:

$$Pes\ fons = Volum\ acer\ fons \cdot densitat\ acer = 0,00083 \cdot 7860 = 6,53\ Kg$$

- Pes total del tanc pulmó buit :

$$Pes\ total = Pes\ acer\ cilindre + Pes\ acer\ fons = 46,46 + 6,53 = 53\ Kg$$

- Pes del tanc pulmó ple d'aigua:

$$Pes_{tanc\ pulmó} = P_{tanc\ buit} + \rho_{acer}(V_{tanc\ total})$$

$$Pes_{tanc\ pulmó} = 53\ Kg + 1000\ \frac{kg}{m^3} (0,26\ m^3) = 313\ Kg$$

- Pes mesclador en operació:

Procedint d'igual forma que pel càlcul del pes del mesclador ple d'aigua:

$$Pes_{pulmó\ en\ operació} = P_{pulmó\ buit} + \rho_{mescla} \cdot V_{pulmó\ total}$$

$$Pes_{pulmó\ en\ operació} = 53\ Kg + 1350\ \frac{Kg}{m^3} \cdot 0,20\ m^3 = 323\ Kg$$

Taula 11.10. Dades resum tancs pulmó.

	Tanc pulmó T-301	Tanc pulmó Depur	Tanc pulmó R3
Cabal volumètric (m ³ /h)	1	4,02	0,68
Temps retenció (min)	12	12	12
Volum tanc (m ³)	0,2	0,8	0,43
Volum sobredimensionat (m ³)	0,26	1,04	0,56
Gruix xapa (mm)	4	4	4
Tipus sostre	Toriesfèric	Toriesfèric	Toriesfèric
Tipus fons	Pla	Pla	Pla
Diàmetre tanc (m)	0,56	0,9	0,73
Altura tanc (m)	0,954	1,53	1,25
Pes tanc buit (kg)	53	136,5	90,5
Pes tanc amb aigua (kg)	314	1182	655
Pes tanc en operació (kg)	323	1207	669

11.7. COLUMNES DE DESTIL·LACIÓ

El present projecte inclou en el procés tres columnes de destil·lació, que formen part de les diferents parts de purificació. Totes les columnes han estat dissenyades a partir del software de simulació de processos Hysys.

Per tal de facilitar la simulació i obtenir un valor aproximat de les dades necessàries a incorporar en la columna de plats s'ha realitzat una aproximació prèvia mitjançant l'opció "Short Cut Distillation". Aquest permetrà obtenir les dades a introduir en la "Distillation Column".

A continuació es mostra el procés seguit per al disseny d'una de les columnes: separació d'àcid nítric d'una mescla : aigua-nítric-sulfúric. El que es pretén és concentrar l'àcid nítric que conté el corrent d'entrada fins a la concentració d'utilització al reactor: 68% en pes. El nítric forma un azeotrop amb l'aigua, al 69%, però en presència de sulfúric s'elimina aquest inconvenient, permetent una destil·lació a major concentració. En aquest projecte, però, no serà necessari superar la concentració d'azeotrop. Un cop eliminat el nítric de la

corrent, la sortida de la torre de destil·lació es passarà a un flash on es retirarà l'aigua que es troba en excés en el procés.

La corrent d'entrada, a tractar en la columna presenta les següents característiques:

Worksheet	
Conditions	Stream Name Entrada
Properties	Vapour / Phase Fraction 0.0000
Composition	Temperature [C] 1.000
K Value	Pressure [kPa] 101.3
User Variables	Molar Flow [kgmole/h] 34.77
Notes	Mass Flow [kg/h] 1734
Cost Parameters	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h] 1.121
	Molar Enthalpy [kJ/kgmole] -4.626e+005
	Molar Entropy [kJ/kgmole·C] 1.313
	Heat Flow [kJ/h] -1.608e+007
	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h] 1.042
	Fluid Package Basis-1

Worksheet Attachments Dynamics

OK

Worksheet	
Conditions	Mass Flows
Properties	HNO3 164.00
Composition	H2O 356.50
K Value	H2SO4 1213.8
User Variables	
Notes	
Cost Parameters	
	Total 1734.25000 kg/h
	Edit... Edit Properties... Basis...

Worksheet Attachments Dynamics

OK

11.7.1. Disseny pel mètode “Short Cut Distillation”

Per realitzar aquest mètode preliminar s’han de definir les condicions d’entrada al simulador, com són: fracció molar del component clau lleuger per cues, fracció molar del clau pesat per caps i les pressió de condensador i reboiler.

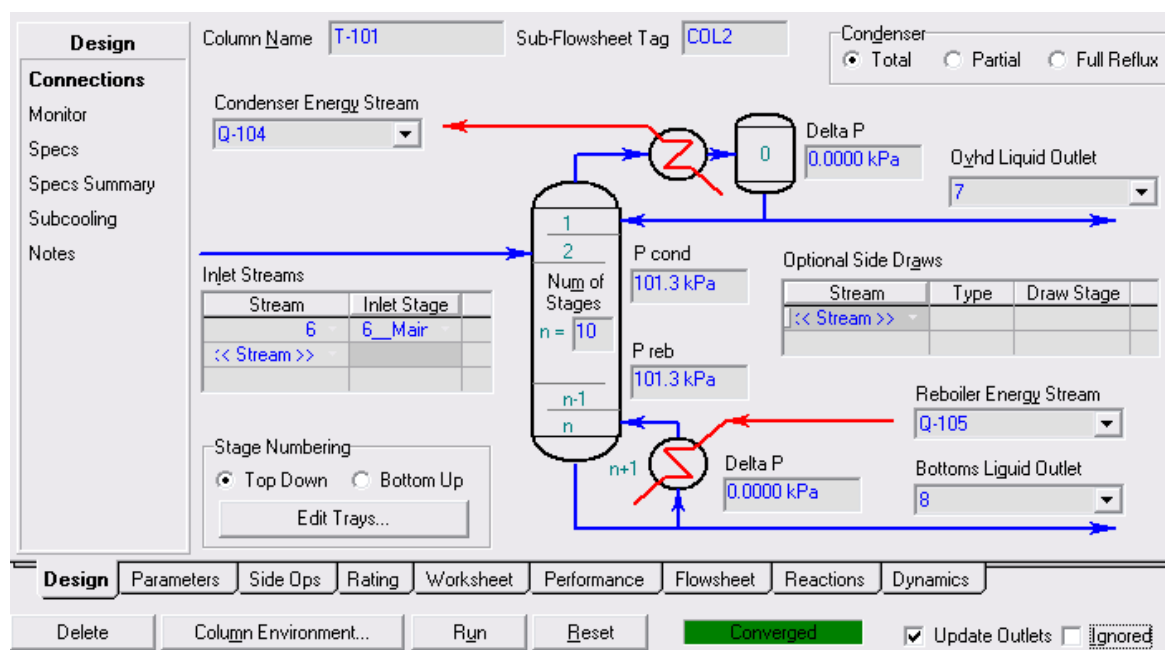
El Short Cut mostrarà a continuació unes dades aproximades a introduir a la columna: relació de reflux mínima, nombre d’etapes necessàries, i plat aproximat de l’aliment.

11.7.2. Disseny pel mètode “Distillation Column”

Un cop es disposa de les dades obtingudes pel mètode Short Cut, es dissenya la columna segons un mètode més rigorós. Caldrà definir inicialment:

- Corrents d’entrada i sortida de matèria i energia.
- Nombre de plats de la columna, i plat de l’aliment
- Pressions de condensador i reboiler.
- Temperatures de condensador i reboiler (optatives).
- Relació de reflux.
- Cabal de sortida per caps.

La finestra que mostrarà el Hysys un cop definides les dades necessàries és:



S'ha emprat una relació de reflux de 8.0, sent el cabal de sortida de destil·lat de 241 Kg/h.

Amb les dades introduïdes es resol la columna. A continuació es mostren les diferents taules i gràfiques dels resultats obtinguts:

The screenshot shows the 'Performance' tab of the process simulation software. It displays the 'Feeds' and 'Products' tables. The 'Feeds' table shows the flow rate and composition of the feed streams. The 'Products' table shows the flow rate and composition of the product streams. The 'Performance' tab is active, and the 'Converged' status is shown at the bottom.

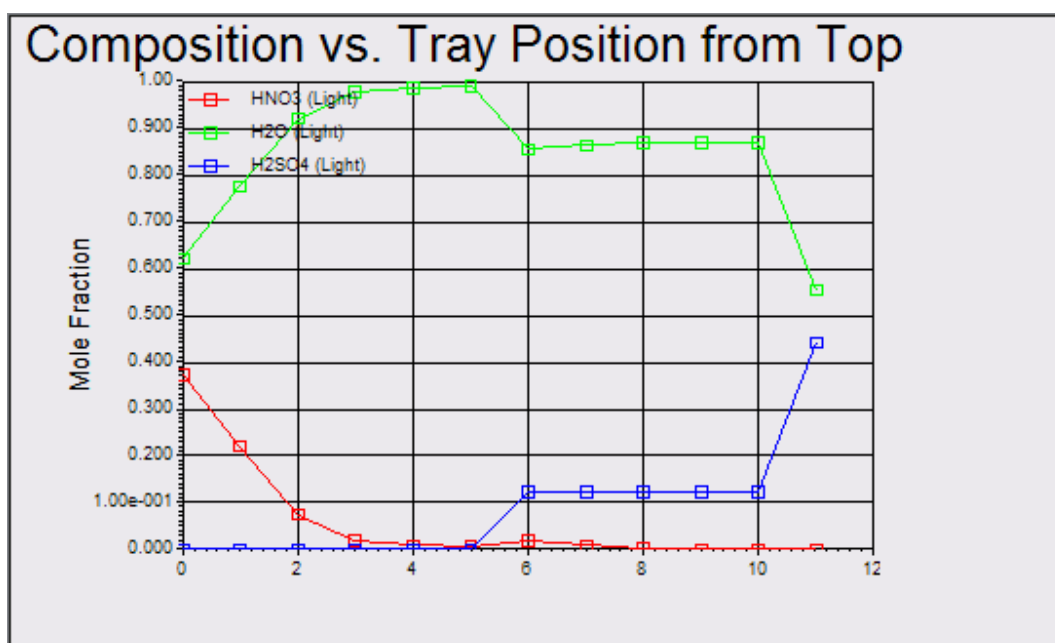
	6				
Flow Rate (kg/h)	1734				
HNO3 (kg/h)	164.0				
H2O (kg/h)	356.5				
H2SO4 (kg/h)	1214				

	7	8			
Flow Rate (kg/h)	241.0186	1.493231e+0			
HNO3 (kg/h)	163.1898	0.8102			
H2O (kg/h)	77.8288	278.6712			
H2SO4 (kg/h)	0.0000	1.213750e+0			

Figura 3. Còbols d'eliminació i dels productes d'el column.

Si es realitza el càlcul del percentatge en pes amb què surt l'àcid nítric es pot veure com s'ajusta molt acuradament a la concentració que es necessita, per tal de poder recircular-ho al reactor (68% pes):

$$\% \text{ Pes nítric} = \frac{163,18 \text{ kg/h}}{\left(163,18 \frac{\text{kg}}{\text{h}} + 77,82 \frac{\text{kg}}{\text{h}}\right)} = 67,7 \%$$

**Figura 11.4.** Representació d'les composicions dels components respecte les etapes d'equilibri.

El gràfic de l'evolució mostra com a l'etapa 0 (caps) surt nítric i aigua amb unes fraccions molars òptimes per tenir el nítric al 68%. Mentre que el sulfúric només surt per cues, amb la resta d'aigua que no s'ha evaporat.

Inicialment, veient el gràfic, es pot esperar que la zona d'esgotament és prescindible (escurçable en etapes), però al realitzar els canvis al software s'observa que realment el plat òptim per l'aliment és el plat 6, per tal de disminuir al màxim la quantitat de nítric que surt per cues (només 0,81 kg/h, el que correspon a una composició molar de 0,0005, fent que no afecti al flash posterior).

L'evolució de les temperatures al llarg de la columna és:

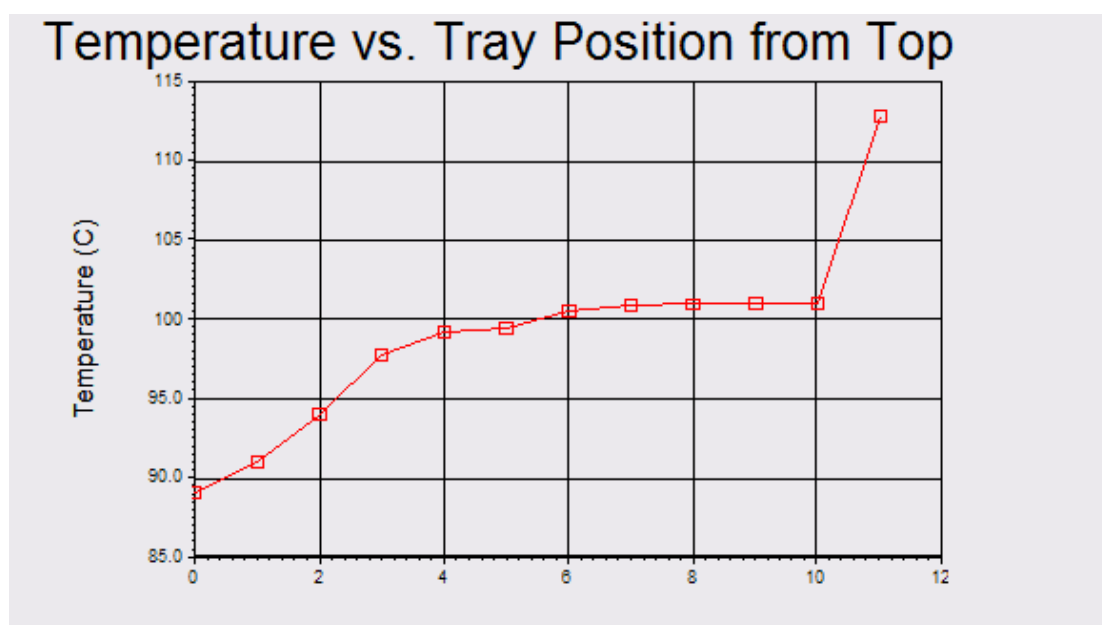


Figura 11.5. Evolució de la temperatura en els diferents plats de la columna.

S'observa com l'increment de temperatures és superior a la zona de rectificació, mentre que la temperatura més alta es troba a la zona d'esgotament. Això està indicant que a la zona d'esgotament s'està realitzant una purificació més acurada, que és la corresponent a acabar d'eliminar la petita quantitat de nítric residual.

11.7.3. Dimensionament de la columna.

Per realitzar el dimensionament de la columna, així com el disseny dels plats s'ha utilitzat l'útilitat: Tray Sizing que presenta el Hysys. Amb aquesta és possible ajustar les dimensions per tal d'aconseguir el funcionament òptim. A la taula següent es mostren els resultats.

Taula 11.11. Resultats de la columna S-301.

Tray Results	
Internals	Sieve
Section Diameter [m]	0.4572
Max Flooding [%]	61.50
X-Sectional Area [m ²]	0.1642
Section Height [m]	3.048
Section DeltaP [kPa]	3.600
Number of Flow Paths	1
Flow Length [mm]	368.3
Flow Width [mm]	401.2
Max DC Backup [%]	27.10
Max Weir Load [m ³ /h-m]	5.218
Max DP/Tray [kPa]	1.132
Tray Spacing [mm]	609.6
Total Weir Length [mm]	270.9
Weir Height [mm]	50.80
Active Area [m ²]	0.1478
DC Clearance [mm]	38.10
DC Area [m ²]	8.198e-003
Side Weir Length [m]	0.2709
Hole Area [m ²]	1.885e-002
Estimated # of Holes/Valves	1058
Chinmey/Sump Res Time	
Relief Area [m ²]	0.0000
Relief - S [mm]	
Relief - A [mm]	
Relief - B [mm]	
Side DC Top Width [mm]	44.45
Side DC Btm Width [mm]	44.45
Side DC Top Length [m]	0.2709
Side DC Btm Length [m]	0.2709

- Disseny mecànic de la columna:

La columna treballa a pressió atmosfèrica, de manera que per realitzar el seu disseny mecànic (càlcul del gruix de xapa), s'utilitzarà el mètode ASME, a pressió interna.

- Càlcul de la cos cilíndric de la columna:

$$t = \frac{P \cdot R}{S \cdot E - (0,6 \cdot P)} + C1 + C2$$

On: P: Pressió de disseny

R: Radi intern del cilindre, mm

E: Factor de soldadura.

S: Límit elàstic (depèn del material escollit i la temperatura)

C1: Tolerància a la corrosió, mm

C2: Tolerància a la fabricació, mm

Donat que la columna opera a pressió atmosfèrica s'assumeix que la temperatura que haurà de suportar l'equip és essencialment 1 atmosfera, més la pressió que pugui exercir el líquid i vapor circulat. Es suposa un sobredimensionament d'un 20%, de manera que la pressió que haurà de suportar serà de 1,2 atmosferes.

A continuació cal designar la temperatura de disseny. La torre treballa a una temperatura màxima de 112°C, i per aquest fet s'agafa com a temperatura de disseny 140°C.

Amb aquestes dades s'obté el valor del límit elàstic pel material de construcció de les columnes: AISI 304-L. La taula 11.12 s'obté de la bibliografia (Sinnot R.K, 1983).

Taula 11.12. Límit elàstic en funció de la temperatura de disseny i del material.

Material	Tensile strength (N/mm ²)	Design stress at temperature °C (N/mm ²)									
		0 to 50	100	150	200	250	300	350	400	450	500
Carbon steel (semi-killed or silicon killed)	360	135	125	115	105	95	85	80	70		
Carbon-manganese steel (semi-killed or silicon killed)	460	180	170	150	140	130	115	105	100		
Carbon-molybdenum steel, 0.5 per cent Mo	450	180	170	145	140	130	120	110	110		
Low alloy steel (Ni, Cr, Mo, V)	550	240	240	240	240	240	235	230	220	190	170
Stainless steel 18Cr/8Ni unstabilised (304)	510	165	145	130	115	110	105	100	100	95	90
Stainless steel 18Cr/8Ni Ti stabilised (321)	540	165	150	140	135	130	130	125	120	120	115
Stainless steel 18Cr/8Ni Mo 2½ per cent (316)	520	175	150	135	120	115	110	105	105	100	95

Per a la temperatura de disseny 140°C, es fa una extrapolació dels valors i s'obté $S=133 \text{ N/mm}^2 = 1311 \text{ atm}$.

Pel factor de soldadura s'escull un valor típic de 0.85, corresponent a una soldadura amb radiografiat parcial.

El radi intern de la columna és de : $0,2285 \text{ m} = 228,5 \text{ mm}$.

S'ha escollit un valor de tolerància a la corrosió de 2 mm, valor adequat per fer front a la forta corrosió que patirà el material, donat que l'operació presenta àcid nítric i sulfúric.

El valor de tolerància a la fabricació s'ha escollit de 1mm.

Sabent les dades es passa a calcular el gruix:

$$t = \frac{1,2 \cdot 228,5}{1311 \cdot 0,85 - (0,6 \cdot 1,2)} + 2 + 1 = 3,00 \text{ mm}$$

S'agafa un gruix de paret de 3,00 mm.

- *Càlculs torisfèrics:*

La forma del capçal de la torre de destil·lació és:

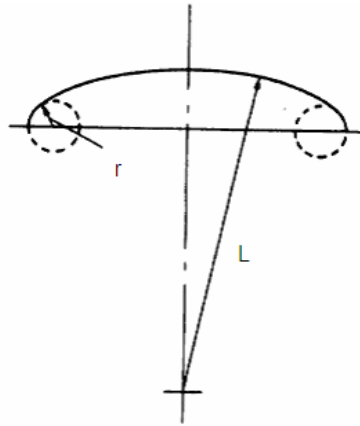


Figura 11.6. Formes dels capçals torisfèrics.

Es considera que el valor de L (radi de l'esfera) es igual al diàmetre del cilindre, i amb un rati r/L de 0,06. Així es pot calcular el gruix de paret pel fons, segons una variant de la fórmula emprada pel càlcul del gruix del cilindre:

$$t = \frac{0,885 \cdot P \cdot L}{S \cdot E - (0,1 \cdot P)} + C1 + C2$$

Les variables P,S,E,C1 i C2 prenen els mateixos valors que els agafats pel càlcul de l'espessor del cilindre.

Es sap que L , essent el diàmetre del cilindre, és: 457 mm, així:

$$t = \frac{0.885 \cdot 1,2 \cdot 457}{1311 \cdot 0.85 - (0,1 \cdot 1,2)} + 2 + 1 = 3,43 \text{ mm}$$

S'agafa un gruix de paret de 3,5 mm.

Resum dels resultats de disseny:

Temperatura d'operació	112 °C
P.interna (atm)	1
Espessor cilindre (mm)	3
Espessor fons (mm)	3,5

- Càlcul del pes de la columna:

Per obtenir el pes de la columna es separa la part cilíndrica del fons torisfèric.:

- Càlcul del pes cilíndric:

$$\begin{aligned}
 \text{Pes cilindre} &= \frac{\pi}{4} \cdot ((D + 2 \cdot t)^2 - D^2) \cdot h_{\text{cilindre}} \cdot \rho_{\text{acer}} = \\
 \text{Pes cilindre} &= \frac{\pi}{4} \cdot ((0,457 + 2 \cdot 3e - 3)^2 - 0,457^2) \cdot 3m \cdot 7860 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \\
 &= 102,2 \text{ Kg}
 \end{aligned}$$

- Càlcul del pes fons torisfèric :

$$\text{Pes fons} = V_{\text{fons}} \cdot \rho$$

On: V_{fons} = Volum de la placa de fons

ρ = Densitat de l'acer

Per trobar el volum de la placa del fons:

$$V_{\text{fons}} = V_{\text{ext}} - V_{\text{int}}$$

On:

$$V_{\text{ext}} = 0,0809 \cdot L_{\text{int}}^3 \quad V_{\text{int}} = 0,0809 \cdot L_{\text{int}}^3$$

L_{int} = Diàmetre del cilindre (m)

$$L_{ext} = L_{int} + 2 \cdot \text{espessor (m)}$$

El resultat obtingut és:

$$V_{int} = 0,0809 \cdot 0,457^3 = 0,0077 \text{ m}^3$$

$$V_{ext} = 0,0809 \cdot (0,457 + 2 \cdot 0,0035)^3 = 0,0082 \text{ m}^3$$

$$V_{fons} = 0,0081 - 0,0077 = 0,00035 \text{ m}^3$$

$$Pes_{fons} = 0,00035 \text{ m}^3 \cdot 7860 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} = 2,78 \text{ Kg}$$

- Càlcul dels pes dels plats:

La columna presenta una sèrie de plats d'equilibri, el pes dels quals es calcula segons l'equació següent.

$$Pes_{plats} = \left((A_p + l_w \cdot (h_w + h_d)) \cdot t \cdot \rho \right) \cdot N_p$$

On:

A_p : àrea del plat (m^2)

l_w : longitud del sobreeixidor (m)

h_w : alçada del sobreeixidor (m)

h_d : alçada del downcomer (m)

t : gruix de la tapa (m)

ρ : densitat del material (AISI 304 L)

N_p : nombre de plats

$$Pes_{plats} = ((0,1642 + 0,2709 (2 \cdot 0,0445)) \cdot 0,0035 \cdot 7860) \cdot 10 = 52 \text{ Kg}$$

- Càlcul pes total de l'equip:

$$\begin{aligned} Pes_{columna} &= Pes_{cilindre} + 2 \cdot Pes_{fons} + Pes_{plats} = 102,2 + 2 \cdot 3,93 \text{ Kg} + 52 \\ &= 162 \text{ Kg} \end{aligned}$$

- Càlcul de l'aïllament de la columna

En aquest cas la columna portarà un cert aïllament, ja que la temperatura a la que arriba el fenol és de 112,8°C. El material és fibra de vidre, recobert per una capa d'alumini, contra les adversitats exteriors. Pel càlcul de l'aïllament:

$$x = \frac{30}{3.6 \cdot \left(\frac{\Delta T}{De}\right)^{1/4}}$$

On: ΔT = increment de temperatura entre interior (40°C) i exterior (25°C)

De: diàmetre extern tanc

X: gruix aïllament (cm)

$$x = \frac{30}{3.6 \cdot \left(\frac{113 - 25}{0,45}\right)^{1/4}} = 3,08$$

Per un aïllament prou segur es sobredimensiona entre un 30 i 50%.

Gruix exacte aïllament = 3,08 cm → Gruix sobredimensionat = 4,3 cm.

Gruix real = 4,5 cm.

A continuació es resumeixen els resultats de les diferents columnes de destil·lació presents a la planta.

Taula 11.13. Dades resum de les columnes de destil·lació.

	Columna S-301	Columna S-601	Columna S-501
Producte per caps	Àcid nítric al 68%	Àcid acètic al 33%	Etanol al 94%
Temperatura entrada (°C)	1	20	79,25
Pressió (atm)	1	1	1
Temperatura màxima treball (°C)	112	155	85,68
Cabal màssic entrada (kg/h)	1734	2212	6258
Nombre de plats	10	15	25
Plat de l'aliment	6	8	22
Relació de reflux	8.0	3	2
Cabal màssic caps (kg/h)	241	2166	5501
Diàmetre columna (m)	0,457	1,83	1,37
Altura columna (m)	3,05	9,1	15,2
Gruix cilindre (mm)	3	3	3
S (atm)	1331	1271	1431
Gruix fons torisfèric (mm)	3,5	4,8	4,2
Pes columna (Kg)	107,7	1345	1607
Pes plats (kg)	52	71	155
Pes total (kg)	162	1416	1762
Gruix aïllament columna (cm)	4,5	4,5	5

11.8. DISSENY DEL FLASH

El procés només presenta un equip flash, just seguit de la primera columna de destil·lació, en la qual s'ha separat nítric d'una mescla aigua-nítric-sulfúric. La corrent de sortida de la torre correspon a l'entrada del flash. La simulació de l'equip, al igual que la columna de destil·lació es realitza mitjançant el simulador Hysys.

- Corrent d'entrada al flash:

Worksheet		
Conditions Properties Composition K Value User Variables Notes Cost Parameters	Stream Name	8
	Vapour / Phase Fraction	0.0000
	Temperature [C]	112.8
	Pressure [kPa]	101.3
	Molar Flow [kgmole/h]	27.86
	Mass Flow [kg/h]	1493
	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0.9356
	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-5.042e+005
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	62.41
	Heat Flow [kJ/h]	-1.405e+007
	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	0.8511
	Fluid Package	Basis-1

◀

▶

Worksheet	Attachments	Dynamics
OK		

Worksheet

Conditions

Properties

Composition

K Value

User Variables

Notes

Cost Parameters

	Mole Fractions
HNO3	0.000462
H2O	0.555310
H2SO4	0.444228

Total

Worksheet

Attachments

Dynamics

OK

Un cop definida la corrent d'entrada es passa a col·locar les variables necessàries pel disseny del flash com són:

Corrent entrada de massa i energia: sortida de la torre de destil·lació.

Corrents sortida de massa i energia

- Dimensionament del flash :

El mateix simulador proporciona les dimensions òptimes del flash:

Geometry	
☒ Cylinder ☐ Sphere	Orientation: ☒ Vertical ☐ Horizontal
Volume [m3]	1.216
Diameter [m]	0.7620
Height [m]	2.667

- Disseny mecànic de la columna:

La columna treballa a pressió, de forma que per realitzar el seu disseny mecànic (càlcul del gruix de xapa), s'utilitzarà el mètode ASME, a pressió interna i pressió externa:

- Càlcul del cos del flash :

$$t = \frac{P \cdot R}{S \cdot E - (0,6 \cdot P)} + C1 + C2$$

On: P: Pressió de disseny

R: Radi intern del cilindre, mm

E: Factor de soldadura.

S: Límit elàstic (depèn del material escollit i la temperatura)

C1: Tolerància a la corrosió, mm

C2: Tolerància a la fabricació, mm

A continuació cal designar la temperatura de disseny. La torre treballa a una temperatura màxima de 140 °C, de manera que s'agafa com a temperatura de disseny 150°C.

Amb aquestes dades s'obté el valor del límit elàstic pel material de construcció de les columnes: AISI 304-L. La taula s'obté de la bibliografia (Sinnot R.K, 1983): $130 \text{ N/mm}^2 = 1291 \text{ atm}$

Pel factor de soldadura s'escull un valor típic de 0.85, corresponent a una soldadura amb radiografiat parcial.

El radi intern de la columna és de : 0,381m = 381 mm.

S'ha escollit un valor de tolerància a la corrosió de 2 mm, valor adequat per fer front a la forta corrosió que patirà el material, donat que l'operació presenta àcid nítric i sulfúric.

El valor de tolerància a la fabricació s'ha escollit de 1mm.

Sabent les dades es passa a calcular el gruix:

$$t = \frac{0,6 \cdot 381}{1291 \cdot 0.85 - (0,6 \cdot 0,6)} + 2 + 1 = 3,2 \text{ mm}$$

S'agafa un gruix de paret de 3,00 mm

- Capçal toriesfèrics:

Es calcula seguint el mateix procediment realitzat a la columna de destil·lació:

$$t = \frac{0,885 \cdot P \cdot L}{S \cdot E - (0,1 \cdot P)} + C1 + C2$$

Les variables P,S,E,C1 i C2 prenen els mateixos valors que els agafats pel càlcul de l'espessor del cilindre.

Es sap que L , essent el diàmetre del cilindre, és: 457 mm, així:

$$t = \frac{0.885 \cdot 0,6 \cdot 762}{1291 \cdot 0.85 - (0,1 \cdot 0,6)} + 2 + 1 = 3,34 \text{ mm}$$

S'agafa un gruix de paret de 3,5 mm.

Resum dels dades disseny:

Temperatura d'operació	140 °C
P.interna (atm)	1
Espessor cilindre (mm)	3
Espessor fons (mm)	3,5

- Càlcul de l'aïllament de la columna

En aquest cas la columna portarà un cert aïllament, ja que la temperatura a la que arriba el fenol és de 140. El material és fibra de vidre, recobert per una capa d'alumini , contra les adversitats exteriors . Pel càlcul de l'aïllament:

$$x = \frac{30}{3.6 \cdot \left(\frac{\Delta T}{De}\right)^{1/4}}$$

On: ΔT = increment de temperatura entre interior (40°C) i exterior (25°C)

De: diàmetre extern tanc

X: gruix aïllament (cm)

$$x = \frac{30}{3.6 \cdot \left(\frac{140 - 25}{0,76}\right)^{1/4}} = 2,37$$

Per un aïllament prou segur es sobredimensiona entre un 30 i 50%.

Gruix exacte aïllament =2,37 cm.

Gruix sobredimensionat = 3,32 cm.

Gruix real = 3,5 cm.

- Càlcul del pes del flash:

Per obtenir el pes de la columna es separa la part cilíndrica del fons toriesfèric.:

- Càlcul pes cilindre:

$$Pes\ cilindre = \frac{\pi}{4} \cdot ((D + 2 \cdot t)^2 - D^2) \cdot h_{cilindre} \cdot \rho_{acer} =$$

$$Pes\ cilindre = 76,80\ Kg$$

- Càlcul pes fons toriesfèric :

$$Pes\ fons = V_{fons} \cdot \rho$$

On: V_{fons} = Volum de la placa de fons (m^3)

ρ = Densitat de l'acer (kg/m^3)

Per trobar el volum de la placa del fons:

$$V_{fons} = V_{ext} - V_{int}$$

On:

$$V_{ext} = 0,0809 \cdot L_{int}^3 \quad V_{int} = 0,0809 \cdot L_{int}^3$$

L_{int} = Diàmetre del cilindre (m)

L_{ext} = $L_{int} + 2 \cdot \text{espessor}$ (m)

El resultat obtingut és:

$$V_{int} = 0,0044\ m^3$$

$$V_{ext} = 0,0047\ m^3$$

$$V_{fons} = 0,00022\ m^3$$

$$Pes\ fons = 1,79\ Kg$$

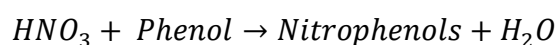
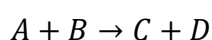
$$Pes\ total\ columna = 2 \cdot 1,79\ Kg + 76,80 = 80,38\ Kg$$

11.9. DISSENY DELS REACTORS

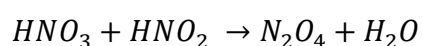
11.9.1. Reactor per a la nitració del fenol

A continuació es presenta el mètode de càlcul emprat per al disseny del reactor de nitració del fenol. És un reactor semicontinu, amb entrada contínua de fenol durant un cert temps de reacció.

La reacció global que es produeix al reactor és:



Amb el mecanisme de reacció següent:



Les corrents d'entrada i sortida del reactor es calculen mitjançant un balanç de matèria per un reactor semicontinu (Scott Fogler), mitjançant el software Matlab (script adjuntat a l'annex pàgina 183) i es presenten les quantitats requerides per un batch d'operació.

COMPONENTS	Reactor Nitració	
	Entrada	Sortida
HNO3	3324	656
Fenol	2927	0
Para-nitrophenol	0	3462
Orto-nitrophenol	0	809
Di-nitrophenol	0	57
H2O addició fenol	732	0
H2O corrent	1663	3157
H2SO4	4855	4855
HNO2	529	0
N2O4	0	1034
TOTAL	14030	14030

Com es pot observar en els corrents s'ha desglossat l'aigua en:

- Aigua corrent: aigua present en l'àcid nítric (al 68% en pes) i l'àcid sulfúric (98% en pes).
- Aigua addició fenol: aigua necessària per diluir el fenol fins a la concentració desitjada a l'entrada del reactor (80% en pes).

El fenol, però, no s'introdueix tot al reactor, sinó que es va carregant de manera que els 2927 Kg hagin entrat al reactor en un temps de 10 minuts.

Aquest fet condiona que la concentració molar de fenol sigui de 8,06 mols/litre i s'introdueixi amb un cabal de 6.4 litres/segon.

Les variables d'operació del reactor són:

	Entrada
Temperatura (°C)	20
Pressió (atm)	5

El reactor treballa a pressió per tal d'evitar la descomposició de l'àcid nítrós a òxids nitrosos, reacció que es duu a terme a la temperatura d'operació (20°C).

Les característiques de la mescla (viscositat, densitat i Cp de cada producte i reactiu) es troben especificades a l'script de Matlab, així com les entalpies de reacció, necessàries pel balanç d'energia.

11.9.1.1 Balanç de matèria. Perfil de concentracions.

El balanç de matèria del reactor s'ha realitzat en base a la bibliografia (Scoth Fogler), per a un reactor semicontinu:

$$\frac{dC_C}{dt} = kC_A C_B - \frac{v_0 C_C}{V}$$

$$\frac{dC_D}{dt} = kC_A C_B - \frac{v_0 C_D}{V}$$

S'introdueixen al Matlab les diferents equacions diferencials necessàries per a cada component, partint d'una concentració inicial de cada producte al reactor, en funció de les dades de que es disposa, segons la patent utilitzada.

A partir del balanç de matèria s'obtenen diferents gràfics:

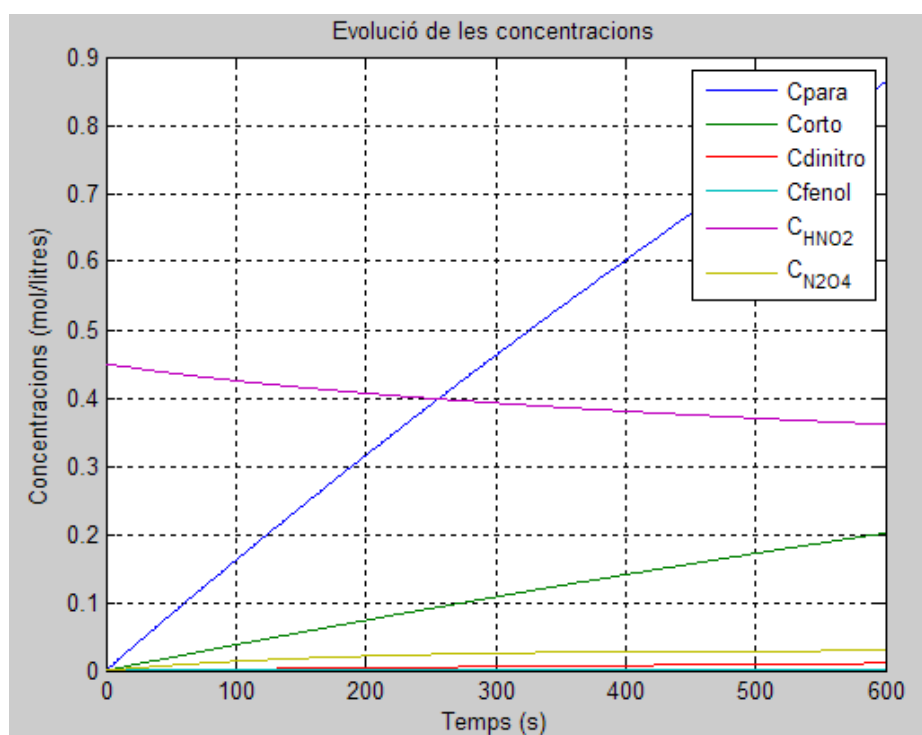


Figura 11.7a. Evolució de les concentracions en funció del temps de reacció.

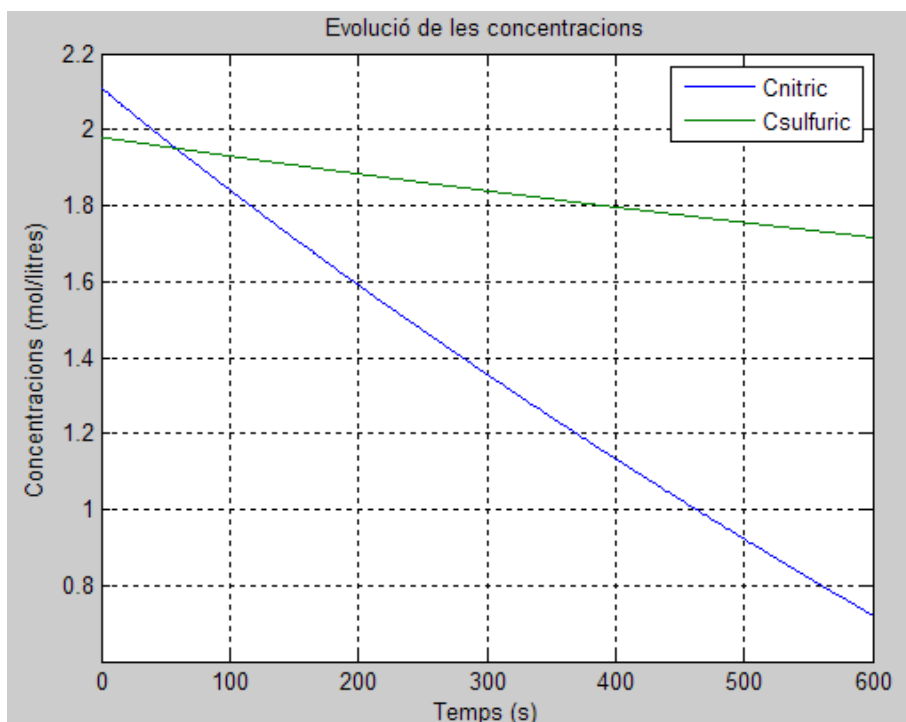


Figura 11.7b. Evolució de les concentracions en front al temps de reacció.

11.9.1.2 Volum del reactor.

Al ser un reactor semicontinu el volum es calcularà segons l'equació (Foggler) :

$$V = V_0 + v_0 \cdot t$$

On: V: Volum reactor

V_0 : volum inicial al reactor (sense fenol)

v_0 : flux volumètric constant d'addició de fenol

t: temps de reacció (addició de fenol)

S'ha considerat un volum inicial de 25000 litres, suficient per contenir els reactius. Com es pot observar, el volum de reacció anirà variant amb el temps, fins arribar al màxim. Aquest fet es plasma en el següent gràfic obtingut amb el Matlab.

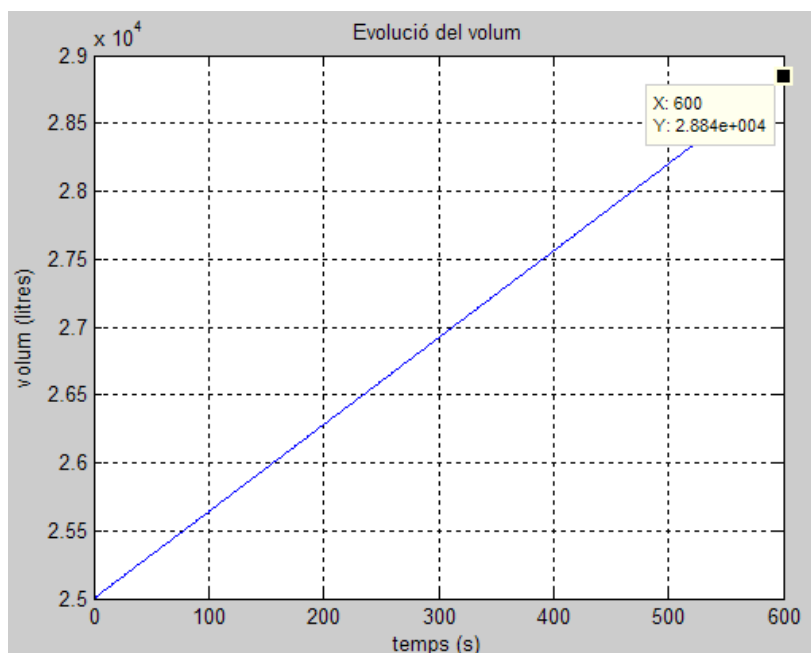


Figura 11.8. Evolució del volum de reacció.

D'aquesta manera s'obté un volum final de 28840 litres. Aquest volum teòric es sobredimensiona, considerant que el volum necessari calculat correspon al 75% del total:

$$Volum\ sobredimensionat = 28,84\ m^3 \cdot \frac{100}{75} = 38,45\ m^3 = 38,5\ m^3$$

11.9.1.3 Dimensionament de reactor.

El primer pas per dimensionar el reactor és calcular el seu diàmetre. Per tal efecte cal tenir en compte que el reactor està format per dos parts: la part cilíndrica i les parts torisfèriques superior i inferior. L'expressió emprada pel càlcul del diàmetre és:

$$D_{int} = \left(\frac{Volum\ reactor}{\left(\frac{1,5}{4}\pi\right) + \left(\frac{1}{12}\pi\right)} \right)^{1/3} = \left(\frac{38,5\ m^3}{\left(\frac{1,5}{4}\pi\right) + \left(\frac{1}{12}\pi\right)} \right)^{1/3} = 3\ metres$$

L'altura del reactor es calcula en funció d'una relació estàndard entre aquesta i el diàmetre:

$$h_{\text{reactor}} = 1,5 \cdot D_{\text{int}} = 1,5 \cdot 3,5 = 4,5 \text{ metres}$$

Així, els valors són:

Diàmetre intern reactor (m)	3
Altura reactor (m)	4,5

11.9.1.4 Balanç d'energia.

El reactor de nitració funciona de forma isotèrmica de manera que tot el calor es bescanvia, aconseguint estar a una temperatura constant de 20°C. El bescanvi es realitza mitjançant un sistema de mitja canya a l'exterior del reactor.

Les equacions emprades pel balanç d'energia són:

$$Q_r = m_{\text{refrigerant}} \cdot C_{p_{\text{refrigerant}}} \cdot (T_{\text{refrigerant}} - T) \cdot \left(1 - \exp\left(-\frac{UA}{C_{p_{\text{refrigerant}}}}\right)\right)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{Q_r + (r_A V)(\Delta H_{Rx}) - \sum F_0 C_{pi}(T - T_o)}{\sum N_i \cdot C_{pi}}$$

El càlcul detallat sobre el balanç es pot trobar a l'script del Matlab corresponent.

- Aigua de refrigeració.

Per tal de bescanviar el calor que es produeix en la reacció es fa passar una quantitat de cabal refrigerant per la mitja canya. Els càlculs de la refrigeració consten de les següents equacions:

$$\frac{dq}{dt} = m \cdot C_p \cdot \Delta T$$

$$\frac{dq}{dt} = U \cdot A_{\text{Besc}} \cdot \Delta T_{ML}$$

$$\Delta T_{ML} = \frac{(T - T_E) - (T - T_S)}{\ln\left(\frac{T - T_E}{T - T_S}\right)} \quad (^\circ\text{C})$$

On: m = cabal d'aigua refrigerant, kg/s

C_p = calor específic de l'aigua

A_{besc} = Area de bescanvi (m^2)

ΔT = salt tèrmic

U : Coeficient global de transmissió de calor

T_E = Temperatura d'entrada del fluid refrigerant = -10°C

T_S = Temperatura de sortida del fluid refrigerant = 0°C

El fluid refrigerant que s'emptra per al bescanvi de calor del reactor de nitració és aigua glicolada al 30%. Aquest fluid, segons bibliografia (Perry's chemical engineer's handbook, 7a edició) presenta una U òptima de $400 \text{ Kcal}/(\text{h}\cdot\text{m}^2\cdot\text{K})$.

Sabent el volum que presenta el reactor es pot calcular quina serà l'àrea màxima disponible per col·locar el bescanvi.

$$\text{Area màxima} = 2 \cdot \pi \cdot r \cdot h = 2 \cdot \pi \cdot 1,5 \text{ m} \cdot 4,5 \text{ m} = 42,41 \text{ m}^2$$

S'agafa un àrea de bescanvi de 30 m^2 , per evitar treballar al màxim.

Per tal que la velocitat de pas del fluid refrigerant per la canonada estigui entre els valors admissibles segons bibliografia (entre 1,5 i 2,5 m/s), s'ha considerat un diàmetre de canonada una mica superior del típic, però encara admissible ($d_i=4$ polzades = 100 mm), amb un gruix de mitja canya de 5 mm.

L'àrea de pas per la mitja canya serà:

$$Area\ pas = \pi \cdot \frac{di^2}{8} = \pi \cdot \frac{0,1^2}{8} = 0,0040\ m^2$$

La velocitat del fluid refrigerant dependrà del cabal de refrigerant triat. En aquest cas s'agafa un cabal adequat per a la velocitat necessària: 5 kg/s

$$Velocitat\ refrigerant = \frac{Cabal\ refrigerant\ (\frac{m^3}{s})}{Area\ pas} = \frac{9\ \frac{kg}{s} \cdot \frac{1\ m^3}{1000\ kg}}{0,0040\ m^3} = 2,25\ m/s$$

S'observa com el cabal es troba dins del rang admissible. Un cop realitzats aquests càlculs es passa a obtenir el número de voltes de la mitja canya pel reactor, així com l'espaiat entre voltes:

$$Longitud\ serpenti = \frac{2 \cdot Area}{\pi \cdot Di} = \frac{2 \cdot 30}{\pi \cdot 0,1} = 191\ metres$$

$$Número\ voltes = N = \frac{Longitud\ serpenti}{2 \cdot \pi \cdot R} = \frac{191}{2 \cdot \pi \cdot 1,35} = 22,5\ voltes$$

$$\begin{aligned} Espaiat\ entre\ voltes &= \frac{Altura\ react - N \cdot di - 2 \cdot espessor \cdot Altura\ reactor}{N} = \\ &= \frac{4,5 - 22,5 \cdot 0,1 - 2 \cdot 0,005 \cdot 4,5}{22,5} = 0,1\ m \end{aligned}$$

En aquest reactor s'ha considerat que el cabal de fluid refrigerant és constant durant tota la reacció, de tal manera que realment la temperatura interior no serà constant.

La seva evolució es presenta a la gràfica següent:

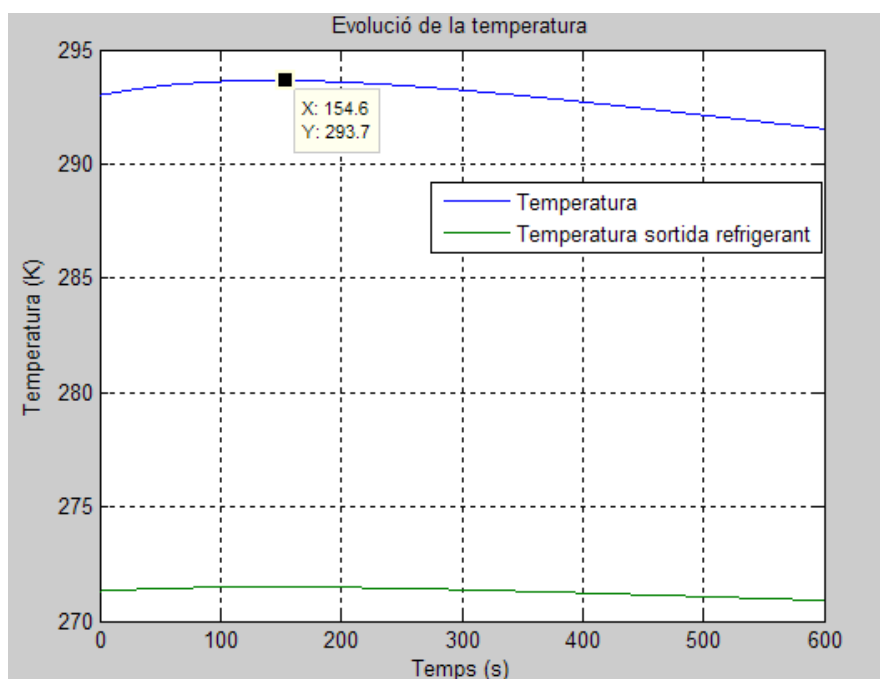


Figura 11.9. Evolució de la temperatura en el reactor.

S'observa com la temperatura d'operació roman gairebé constant a 293 K, de manera que es pot considerar un funcionament pràcticament isoterm del reactor.

11.9.1.5 Disseny mecànic.

Un cop obtinguts els valors generals de diàmetre i altura del reactor s'ha de realitzar un càlcul més acurat, tenint en compte que el reactor treballa a pressió (5 atm). Per tal de calcular el gruix necessari de paret es realitzarà pel mètode ASME a pressió interna (descriu al disseny de columnes de destil·lació), així com el mètode ASME a pressió externa, enfocat a equips a pressió.

Donat que el reactor actua a pressió, es calcula la pressió d'operació que ha de suportar, de la següent manera:

$$P = P_{op} + h_1 \cdot g \cdot \rho$$

On: P_{op} : Pressió d'operació = 5 atm

h_1 : Altura de la columna de líquid, igual a l'alçada del reactor.

g : Gravetat, 9.81 m/s^2

ρ : Densitat de la mescla a tractar.

$$P = 5 \text{ atm} + 4,5 \text{ m} \cdot 9.81 \frac{\text{m}}{\text{s}^2} \cdot 1350 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \cdot \frac{1 \text{ atm}}{101325 \text{ N/m}^2} = 5,58 \text{ atm}$$

Es comença per realitzar un càlcul inicial del gruix a pressió interna:

$$t = \frac{P \cdot R}{S \cdot E - (0,6 \cdot P)} + C1 + C2 = \frac{5,58 \cdot 1500}{1631 \cdot 0.85 - (0,6 \cdot 5,58)} + 1 + 2 = 13,3 \text{ mm}$$

$$= 13 \text{ mm}$$

On: P : Pressió de disseny = 5,58 atm

R : Radi intern del cilindre, mm = 1500

E : Factor de soldadura.

S : Límit elàstic (depèn del material escollit i la temperatura)= $165 \text{ N/mm}^2 = 1631 \text{ atm}$.

$C2$: Tolerància a la corrosió, mm

$C2$: Tolerància a la fabricació, mm

A continuació es passa al mètode ASME a pressió externa:

Es calcula el diàmetre extern com:

$$De = Di + 2 \cdot t$$

On: De : diàmetre extern (mm)

Di : diàmetre intern (mm)

$$De = 3000 + 2 \cdot 13 = 3026 \text{ mm}$$

L'altura del fons torisfèric es calcula per un espessor suposat , considerant el ratio r/L de 0.1.

$$t = \frac{0,885 \cdot P \cdot L}{S \cdot E - (0,1 \cdot P)} + C1 + C2$$

On: P: Pressió de disseny = 5,58 atm

L: Diàmetre de la esfera, mm = 3000

E: Factor de soldadura : 0.85

S: Límit elàstic (depèn del material escollit i la temperatura)=1631 atm

C1: Tolerància a la corrosió, mm

C2: Tolerància a la fabricació, mm

$$t = \frac{0,885 \cdot 5,58 \cdot 3000}{1631 \cdot 0.85 - (0,1 \cdot 5,58)} + 1 + 2 = 10,7 \text{ mm} = 11 \text{ mm}$$

- Càlcul de l'agitador

El disseny de l'agitador es realitza seguint els passos emprats en el disseny de l'agitador del tanc de mescla. Característiques:

Model de flux	Radial /Axial
Viscositat fluid	Fins a 20 cp
Velocitat tangencial del fluid	9 m/s
Régim	Turbulent
Geometria del fons	Toriesferic
Tipus de pales	Planes inclinades.

Donat que l'agitador presenta una geometria centrada al seu centre, es necessitarà instal·lar una sèrie de bafles, que evitaran l'aparició de vòrtex.

La relació de dimensions són les mostrades a la figura 1 anteriorment detallada.

Donat que anteriorment s'ha calculat el diàmetre intern que ha de presentar al reactor, és possible obtenir el valor de les diferents distàncies.

Distàncies (m)	Reactor
D1	3
D2	1,011
H1	3
H2	0,9
H3	0,179
Delta 1	0,3
Delta 2	0,06

- Càlcul de la potència de l'agitador:

Dins del disseny de l'agitador és important conèixer la potència necessària per disposar de l'agitació requerida, la qual ve definida per la següent fórmula:

$$P = Np \cdot N^3 \cdot d_2^5 \cdot \rho$$

On: P: Potència necessària per l'agitador (W)

Np: Número de potència

d₂: Diàmetre de l'agitador (m)

N: revolucions de l'agitador (rps)

ρ : densitat del fluid (Kg/m³)

Per tal d'obtenir el número de potència s'utilitza l'equació de Reynolds:

$$Re = \frac{N \cdot d_2^2 \cdot \rho_A}{\mu_A}$$

On: μ = Viscositat del fluid (kg/m·s)

N = 1 rps

La viscositat de la mescla (aigua-para-nitrofenol) és d'aproximadament 1,5 · 10⁻⁴ kg/ms i la seva densitat es de 1050 Kg/m³. Amb aquestes dades es calcula el Reynolds.

$$Re = \frac{1 \cdot 1,011 \cdot 1350}{1,002 \cdot 10^{-3}} = 1362125,72$$

Amb el valor del Reynolds es passa a mirar la gràfica que el relaciona amb el nombre de potència, per a l'agitador desitjat. En aquest cas s'obté un valor $N_p = 5$, i es calcula la potència necessària per a l'agitador com:

$$P = 5 \cdot 1^3 \cdot (1,011)^5 \cdot 1350 = 7129 \text{ W} = 7,129 \text{ KW}$$

Per tal d'analitzar aquesta potència de forma qualitativa es passa a dividir el valor entre el volum del mesclador. De tal manera que:

$$\frac{\text{Potència agitador}}{\text{Volum del reactor}} = \frac{7,123 \text{ kW}}{38,5 \text{ m}^3} = 0,18 \text{ kW/m}^3$$

La següent taula presenta el resum de les dades de l'agitador:

Diàmetre de turbina (m)	1,011
N = velocitat de rotació (rps)	1
Reynolds	1362125,72
N_p = número de potència	5
Potència (kW)	7,129
Potència (kW/m ³)	0,18

Aquests valors de potència corresponen a una agitació moderada (segons la taula 10.14) de manera que s'assumeix un disseny correcte de l'agitador.

Table 10.14. Power requirements — baffled agitated tanks

Agitation	Applications	Power, kW/m ³
Mild	Blending, mixing	0.04–0.10
	Homogeneous reactions	0.01–0.03
Medium	Heat transfer	0.03–1.0
	Liquid-liquid mixing	1.0–1.5
Severe	Slurry suspension	1.5–2.0
	Gas absorption,	1.5–2.0
	Emulsions	1.5–2.0
Violent	Fine slurry suspension	>2.0

- Càlcul del volum de l'agitador:

Per calcular el volum de l'agitador s'utilitzen les següents equacions de la bibliografia:

$$V_{agitador} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{pales}^2 \cdot H_{pales} + \frac{\pi}{4} \cdot D_{tub}^2 \cdot H_{tub}$$

$$H_{tub} = H_{total} - H_{fons pales}$$

Les dades necessàries pel càlcul de l'agitador es presenten a la taula :

Diàmetre tub (m)	0,05
Altura tub (m)	3,6
Diàmetre pales (m)	1,011
Altura pales (m)	0,179

$$V_{agitador} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{pales}^2 \cdot H_{pales} + \frac{\pi}{4} \cdot D_{tub}^2 \cdot H_{tub}$$

$$V_{agitador} = \frac{\pi}{4} \cdot 1,011^2 \cdot 0,179 + \frac{\pi}{4} \cdot 0,05^2 \cdot 3,6 = 0,150 \text{ m}^3$$

- Càlcul de les pantalles deflectores:

En aquest apartat es calcula les pantalles deflectores necessàries per a una bona mescla.

Pel càlcul serà necessari conèixer l'espai entre pantalles (l_b), segons l'equació:

$$l_b = 0,3 \cdot D_{reactor}$$

$$N^{\circ} \text{ pantalles deflectores} = \frac{L}{l_b} - 1$$

Donat que el diàmetre del mesclador és: 0,354 m, l'espai entre pantalles serà:

$$l_b = 0,3 \cdot 3 = 0,9$$

$$N^{\circ} \text{ pantalles deflectores} = \frac{3}{0,9} - 1 = 3 \text{ pantalles}$$

- Càlcul del pes de l'agitador:

$$Pes_{agitador} = V_{agitador} \cdot \rho_{agitador}$$

$$Pes_{agitador} = 0,15 \, m^3 \cdot 7860 \frac{Kg}{m^3} = 1179 \, Kg$$

- Pes del reactor:

El reactor es divideix en un cos cilíndric, dos fons toriesfèrics i l'agitador.

- Càlcul pes cilindre:

$$Pes_{cilindre} = \frac{\pi}{4} \cdot ((D + 2 \cdot t)^2 - D^2) \cdot h_{cilindre} \cdot \rho_{acer} =$$

$$Pes_{cilindre} = \frac{\pi}{4} \cdot ((3 + 2 \cdot 13e - 3)^2 - 3^2) \cdot 4,5 \, m \cdot 7860 \frac{kg}{m^3} = 4352,4 \, Kg$$

- Càlcul pes fons toriesfèric :

$$Pes_{fons} = V_{fons} \cdot \rho$$

On: V_{fons} = Volum de la placa de fons

ρ = Densitat de l'acer

Per trobar el volum de la placa del fons:

$$V_{fons} = V_{ext} - V_{int}$$

On: $V_{ext} = 0,0809 \cdot L_{int}^3 \quad V_{int} = 0,0809 \cdot L_{int}^3$

$$L_{int} = \text{Diàmetre del cilindre (m)}$$

$$L_{ext} = L_{int} + 2 \cdot \text{esponsor (m)}$$

El resultat obtingut és:

$$V_{int} = 0,0809 \cdot 3^3 = 2,1843 \text{ m}^3$$

$$V_{ext} = 0,0809 \cdot (3 + 2 \cdot 0,011)^3 = 2,23 \text{ m}^3$$

$$V_{fons} = 2,23 - 2,1843 = 0,0457 \text{ m}^3$$

$$Pes \text{ fons} = 0,0457 \text{ m}^3 \cdot 7860 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} = 359,2 \text{ Kg}$$

$$Pes \text{ total reactor} = Pes \text{ cilindre} + 2 \cdot Pes \text{ fons} + Pes \text{ agitador} =$$

$$Pes \text{ total reactor} = 4352,4 + 2 \cdot 359,2 + 1179 = 6249,8 \text{ Kg}$$

- Pes del reactor ple d'aigua:

El pes del mesclador ple d'aigua es calcula segons la fórmula:

$$Pes_{\text{reactor amb aigua}} = P_{\text{reactor buit}} + \rho_{\text{acer}} (V_{\text{reactor total}} - V_{\text{agitador}})$$

$$Pes_{\text{mesclador amb aigua}} = 6248,8 \text{ Kg} + 1000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} (38,5 \text{ m}^3 - 0,15 \text{ m}^3) = 44598,8 \text{ Kg}$$

- Pes mesclador en operació:

Procedint de la mateixa manera que pel càlcul del pes del mesclador ple d'aigua:

$$Pes_{\text{mesclador en operació}} = P_{\text{mesclador buit}} + \rho_{\text{mescla}} (V_{\text{mesclador total}} - V_{\text{agitador}})$$

$$Pes_{\text{mesclador en operació}} = 6248,8 \text{ Kg} + 1350 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} (38,5 \text{ m}^3 - 0,15 \text{ m}^3) = 58021,3 \text{ Kg}$$

- Càlcul del disc de ruptura

Per evitar problemes per sobre-presions al reactor, s'utilitza un disc de ruptura, que generalment té una ruptura entre un 50-75 % més que la pressió d'operació, de tal manera que:

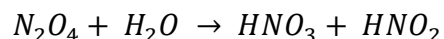
$$P_{ruptura} = 1.65 \cdot P_{operació} = 9,2 \text{ atm}$$

11.9.2. Reactor tèrmic

El procés presenta un reactor tèrmic a la sortida del reactor de nitració, amb la funció de recuperar els òxids que es desprenen, en forma d'àcid nítrics.

Es considera que en obrir la vàlvula del reactor de nitració l'àcid nítrics present a la mescla, un cop acabada la reacció, passa per descompressió, a òxids nítrics. Es suposa que es descompon només en N_2O_4 .

Aquests òxids nítrics s'envien al reactor tèrmic com un flux d'entrada constant, mentre que dins del reactor es té aigua, per tal que es produeixi la següent reacció:



La reacció és endotèrmica amb $\Delta H_r = 46,2 \text{ J/mol}$

Aquest reactor es resol mitjançant els mateixos balanços de matèria i energia que el reactor de nitració (amb el software Matlab), considerant-ho com un reactor semicontinu en què l'addició d'òxids nítrics es realitza de forma contínua, i que tal com entren passen a estar en contacte amb l'aigua que roman dins del reactor, reaccionant instantàneament cap a àcid nítrics.

La quantitat d'aigua present al tanc abans que entrin els òxids s'ha calculat de manera que en els productes obtinguts es tingui àcid nítric al 68 % , de forma que pugui ser reintroduït al reactor de nitració, juntament amb l'àcid nítrics, recuperant així part del reactiu.

A continuació es mostra un resum del balanç de matèria al reactor:

FORMACIÓ DE NÍTRIC I NITRÓS A PARTIR DELS ÒXIDS GASOS I AIGUA	COMPONENTS	Entrada	Sortida
	HNO3	0	708,2
	Fenol	0	0
	Para	0	0
	Orto	0	0
	Dinitro	0	0
	H2O	535,9	333,3
	H2SO4	0	0
	HNO2	0	528,4
	N2O4	1034	0
	H2O DILUCIÓ	0	0
	TOTAL	1569,9	1569,9

11.9.3. Reactor per a la hidrogenació del p-nitrofenol

11.9.3.1 Balanç de matèria.

El segon reactor funciona isotèrmicament a 80°C i opera en semicontinu puix que existeix una entrada i una sortida contínua d'hidrogen gas, reactiu limitant, a diferència del p-nitrofenol líquid que és carregat al reactor prèviament. La quantitat d'hidrogen que entra de manera contínua al reactor és la necessària per recompensar la quantitat d'hidrogen que surt aconseguint una concentració dins del reactor constant al llarg del temps. Així, el terme de Sortida-Entrada del balanç de matèria és zero, i per tant, el balanç es considera igual al d'un RDTA.

El balanç de matèria considerant una velocitat de reacció constant en tot el volum, i una densitat i un volum constant en tot el procés és el següent:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{-\vartheta_A}{A_o} \cdot r$$

On:

X = grau de conversió respecte l'hidrogen

t = temps de reacció

ϑ_A = coeficient estequiomètric de l'hidrogen = -3

A_o = concentració d'hidrogen inicial = $H \cdot P_A$, Kmól/m³

H = constant de Henry = $3.734 \cdot 10^{-2}$ Kmól/(m³·MPa)

P_A = pressió de l'hidrogen = 3 MPa

r = velocitat de reacció = $\frac{w \cdot k_1 \cdot A \cdot B}{1 + K_A \cdot A + K_B \cdot B}$, Kmól/(m³·s)

w = càrrega del catalitzador = 0.3 Kg/m³

k_1 = constant cinètica = 64.484 (m³/Kg)·(m³/Kmól·s)

K_A = constant d'adsorció d'hidrogen = $1.029 \cdot 10^4$ m³/Kmól

K_B = constant d'adsorció del p-nitrofenol = $4.321 \cdot 10^3$ m³/Kmól

A i B són les concentracions de l'hidrogen i del p-nitrofenol respectivament, i tot seguit es mostren les equacions corresponents juntament amb les concentracions dels productes.

$$A = \text{Concentració d'hidrogen} = A_o = 0.11 \text{ M}$$

$$B = \text{Concentració del p-nitrofenol} = B_o - \frac{\vartheta_B}{\vartheta_A} \cdot A_o \cdot X$$

$$C = \text{Concentració del p-aminofenol} = C_o - \frac{\vartheta_C}{\vartheta_A} \cdot A_o \cdot X$$

$$D = \text{Concentració de l'aigua} = D_o - \frac{\vartheta_D}{\vartheta_A} \cdot A_o \cdot X$$

On:

B_0 = concentració de p-nitrofenol inicial = 0.9 M

C_0 = concentració de p-aminofenol inicial = 0 M

D_0 = concentració de l'aigua inicial = 2.81 M

ϑ_B = coeficient estequiomètric del p-nitrofenol = -1

ϑ_C = coeficient estequiomètric del p-aminofenol = -1

ϑ_D = coeficient estequiomètric de l'aigua = -2

Amb totes aquestes equacions, sabent que el temps de reacció dura 70 minuts, s'elabora un script mitjançant el programa informàtic Matlab (script adjunt a la pàgina 196) per mostrar, un cop trobat el perfil de conversió, els perfils de concentració. Els resultats són els següents:

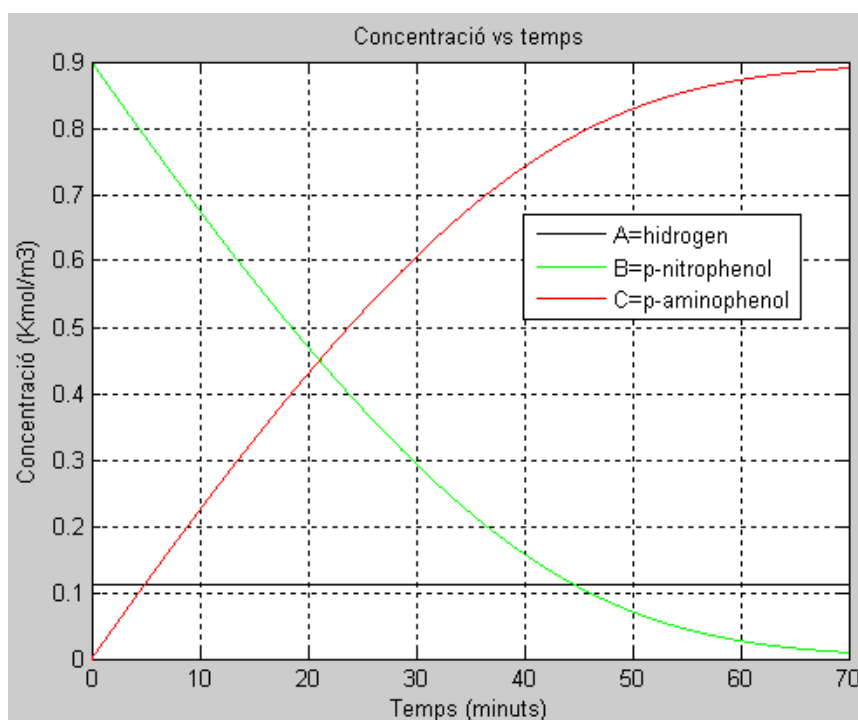


Figura 11.10a. Perfil de concentracions al llarg del temps de la segona reacció.

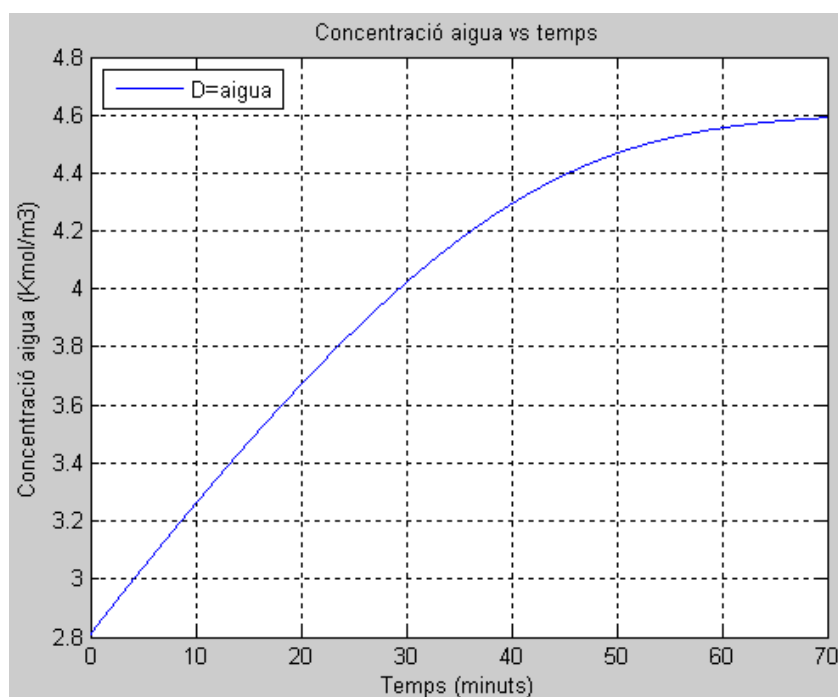


Figura 11.10b. Perfil de concentració de l'aigua al llarg del temps de la segona reacció.

En la figura 11.10a es pot observar que en tot el temps de reacció la concentració de l'hidrogen roman constant a 0.11 M mentre que la del p-nitrofenol disminueix fins gairebé ser zero, fet desitjat. D'altra banda, la concentració del p-aminofenol augmenta estequiomètricament segons la reacció obtenint 0.89 M igual que ho fa l'aigua.

11.9.3.2 Volum del reactor.

Es suposa un volum de reacció escaient per produir un total de 20 tones de paracetamol al dia mitjançant 6 batchos tenint en compte la concentració final del p-aminofenol format i considerant que un mol d'aquest serà un mol de paracetamol segons l'estequiometria de la tercera reacció.

Fent els càlculs necessaris es té que el volum de reacció ocupa 27 m³.

Comprovació:

$$N = C \cdot V \text{ (kmol)}$$

On:

N = nº de mols de p-aminofenol = nº de mols de paracetamol

C = concentració de p-aminofenol, kmol/m³

V = volum de reacció = 27 m³

Aleshores,

$$N = 0,89 \text{ kmol/m}^3 \cdot 27 \text{ m}^3 = 24,04 \text{ kmol paracetamol}$$

Sabent que el pes molecular del paracetamol és de 151,17 kg/kmol es calcula el nombre de tones al dia mitjançant 6 batchos.

$$24,04 \text{ kmol paracetamol} \cdot \frac{151,17 \text{ kg}}{\text{kmol}} \cdot \frac{1 \text{ Tn}}{1000 \text{ kg}} = 3,63 \text{ Tn/ batch}$$

$$3,63 \frac{\text{Tn}}{\text{batch}} \cdot \frac{6 \text{ batch}}{\text{dia}} = 21,81 \frac{\text{Tn}}{\text{dia}} \text{ paracetamol}$$

A fets reals, la concentració de p-aminofenol a l'entrada del tercer reactor no serà la mateixa que la de la sortida d'aquest reactor sinó que hi hauran possibles pèrdues entremig al passar per diferents equips. En el càlcul anterior no s'ha tingut en compte aquest fet però sí en el resultat ja que s'obté 1,81 tones de més com a factor de seguretat.

c) Diàmetre, alçada i volum del reactor

Es calcula el diàmetre del reactor a partir del volum de reacció ($V=27\text{m}^3$) i s'aproxima a un valor exacte.

$$\text{diàmetre} \rightarrow d = \sqrt[3]{V \cdot 4 / (\pi \cdot 1.5)} = 2.84 \text{ m} \approx 3 \text{ m}$$

A partir del diàmetre anterior es troba l'alçada seguint la relació $h/d = 1.5$

$$h = 1.5 \cdot d = 1.5 \cdot 3 = 4.5 \text{ m}$$

Amb les dues dimensions conegudes es determina el volum del reactor segons:

$$V_{\text{reactor}} = \frac{\pi}{4} \cdot d^2 \cdot h = 31,8 \text{ m}^3$$

11.9.3.3 Balanç d'energia.

Com ja s'ha comentat aquest reactor funciona isotèrmicament de manera que tot el calor de reacció és bescanviat per un element extern aconseguint romandre la temperatura constant a 80°C. Com que el calor que desprèn és tan elevat ja que es tracta d'una reacció molt exotèrmica, es fa necessari l'aplicació d'un serpentí intern i d'una mitja canya a l'exterior.

A continuació es mostra l'equació del balanç d'energia que descriu el calor generat (q) per la reacció i el calor generat acumulat.

$$\text{Calor generat: } \frac{dq}{dt} = \frac{B_o \cdot V}{\vartheta_A} \cdot \Delta H \cdot \frac{dX}{dt} \left(\frac{KJ}{s} \right)$$

$$\text{Calor generat acumulat: } q = \frac{B_o \cdot V}{\vartheta_A} \cdot \Delta H \cdot \int_0^X dX \text{ (KJ)}$$

On ΔH és l'entalpia de reacció calculada a partir de les entalpies de formació estàndard ΔH_f° de cada component a 1 atm i a 298°K.

Component	Δh_f° (KJ/mol)	Estat
p-nitrofenol	-213,8	sòlid*
hidrogen	0	gas
p-aminofenol	-184,23	sòlid*
aigua	-285,83	líquid

$$\Delta H = [(-184,23) + (-285,83 \cdot 2)] - [(-213,8) + (3 \cdot 0)]/3 = -180,7 \text{ KJ/mol}$$

Un cop això, es representen els resultats a les figures 11.11 i 11.12 mitjançant el matlab (script de l'annex pàgina 196).

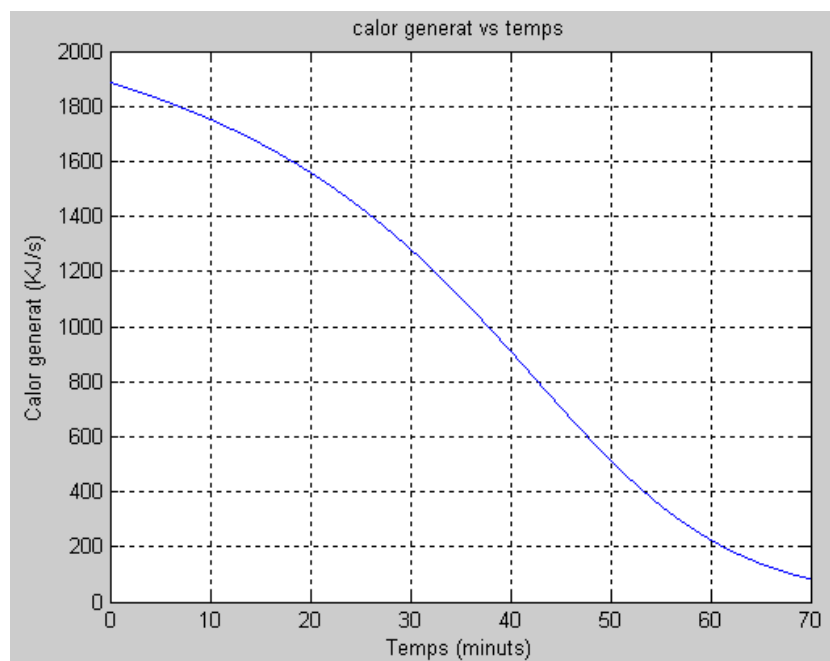


Figura 11.11. Calor generat d'el s'aconteixi enfront el temps.

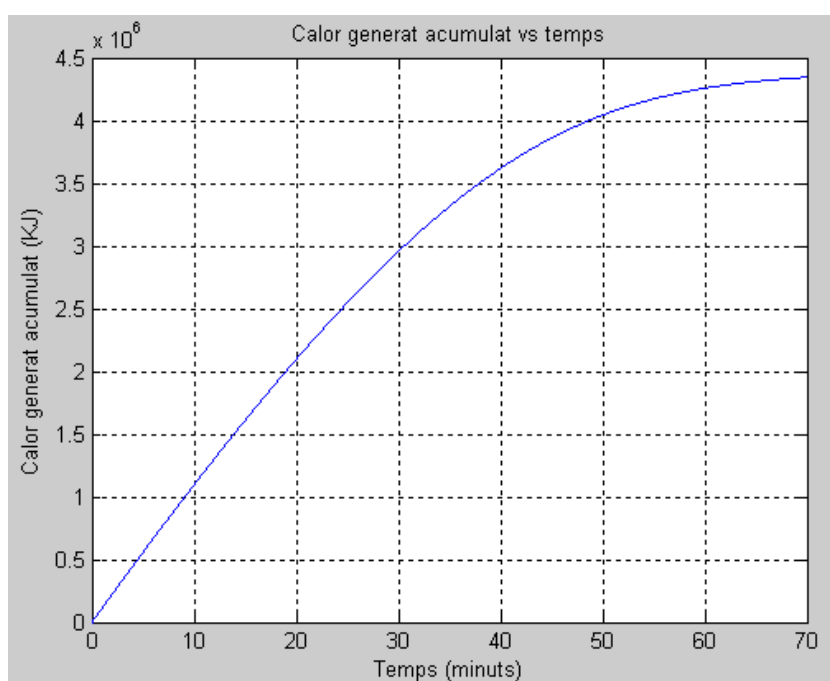


Figura 11.12. Calor generat acumulat d'el s'aconteixi enfront el temps.

Com es pot apreciar en la figura 11.11 el calor generat disminueix amb el temps de manera que al principi s'allibera molta calor, 1887 KW, mentre que al final de la reacció se'n desprèn molt poca. En contra posició, la figura 11.12 mostra el calor acumulat generat que lògicament augmenta amb el temps deixant entreveure una pendent cada cop més tancada degut a que cada cop es desprèn menys calor. El calor acumulat total arriba fins a $4,35 \cdot 10^6$ KJ amb el que es pot reafirmar que la reacció és fortament exotèrmica.

e) Cabal d'aigua refrigerant

El calor generat vist a la figura 11.11, un 40% és bescanviat per la mitja canya i el 60% restant és bescanviat pel serpentí interior mitjançant aigua com a refrigerant en ambdós casos. El salt tèrmic de l'aigua tan d'un bescanviador com de l'altre és de 35°C de manera que el fluid entra a 25°C i surt a 60°C. Aquesta aigua escalfada a 60°C es recircularà de manera que es barrejarà amb d'altres per tal d'entrar a la torre de refrigeració a 45°C i sortir a 25°C.

Per determinar el cabal necessari per cadascun dels bescanviadors es parteix de l'equació del calor guanyat pel fluid refrigerant.

$$\boxed{\frac{dq}{dt} = m \cdot C_p \cdot \Delta T} \quad \text{on } \frac{dq}{dt} \text{ equival al calor que genera la reacció}$$

m = cabal d'aigua refrigerant, kg/s

C_p = calor específic de l'aigua = 4.18 KJ/(kg °C)

ΔT = salt tèrmic = 35°C

Aïllant el cabal màssic i distribuint el calor s'obté:

$$m_{1/2canya} = \frac{0,4 \cdot dq/dt}{C_p \cdot \Delta T}$$

$$m_{serpentí} = \frac{0,6 \cdot dq/dt}{C_p \cdot \Delta T}$$

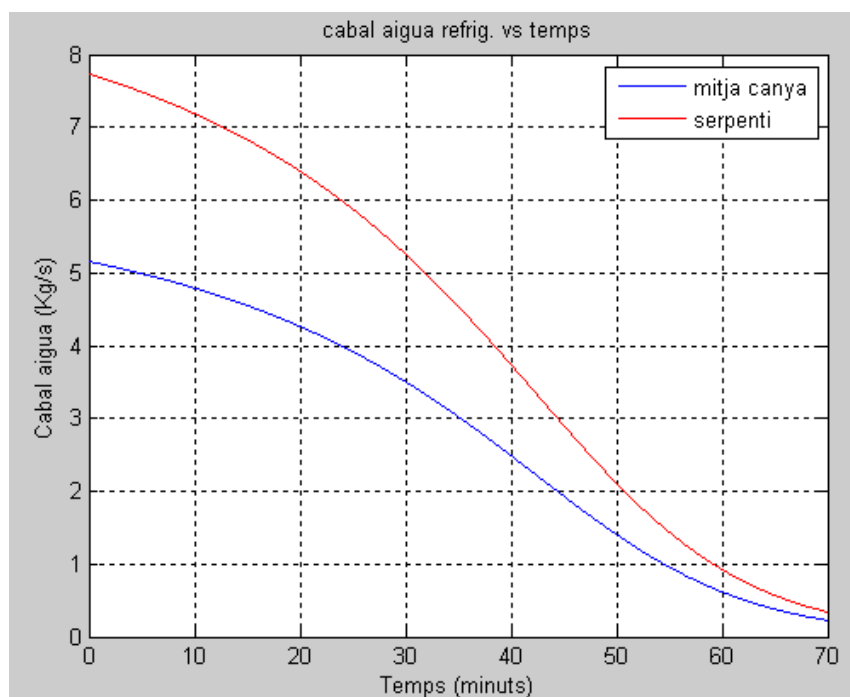


Figura 11.13. Cabal d'aigua refrigerant necessària enfront el temps per la mitja canya i per serpenti.

El fet que el refrigerant del serpenti absorbeixi més calor implica circular-hi més cabal, així s'obté un cabal màxim de 7.74 Kg/s i en menor quantitat es troba el cabal màxim de la mitja canya 5.16 kg/s. Els dos refrigerants aniran disminuint al llarg del temps ja que al final de la reacció hi haurà menys calor per bescanviar.

f) Àrea de bescanvi (A_{Besc})

Per tal de calcular les àrees de bescanvi s'utilitza la següent equació:

$$\boxed{\frac{dq}{dt} = U \cdot A_{Besc} \cdot \Delta T_{ML}} \quad \text{on } \frac{dq}{dt} \text{ equival al calor que genera la reacció}$$

El coeficient global de transmissió de calor, U, tan de la mitja canya com del serpenti s'ha suposat sabent que el fluid refrigerant és aigua i que la mescla a agitar és líquida tret de l'hidrogen gas. Així doncs, per un serpenti i per una mitja canya amb aquestes característiques es troba a la bibliografia (Perry's chemical engineer's handbook, 7a edició) que la U és igual a 1000 i 500 Kcal/(h·m²·°K) respectivament.

Si els fluids refrigerants del serpentí i de la mitja canya entren i surten a la mateixa temperatura, l'increment de temperatura mitjana logarítmica ΔT_{ML} entre el fluid i el reactor serà idèntic per ambdós casos.

$$\Delta T_{ML} = \frac{(T - T_E) - (T - T_S)}{\ln\left(\frac{T - T_E}{T - T_S}\right)} \quad (^{\circ}C)$$

On: T_E = Temperatura d'entrada del fluid refrigerant = 25°C

T_S = Temperatura d'entrada del fluid refrigerant = 60°C

$$\Delta T_{ML} = \frac{(80 - 25) - (80 - 60)}{\ln\left(\frac{80 - 25}{80 - 60}\right)} = 34,6^{\circ}C$$

Un cop sabent això, es troben les àrees necessàries de bescanvi segons:

$$A_{Besc\ 1/2canya} = \frac{0,4 \cdot dq/dt}{U_{1/2canya} \cdot \Delta T_{ML}}$$

$$A_{Besc\ serpentí} = \frac{0,6 \cdot dq/dt}{U_{serpentí} \cdot \Delta T_{ML}}$$

Els resultats obtinguts es mostren a la següent figura 11.14.

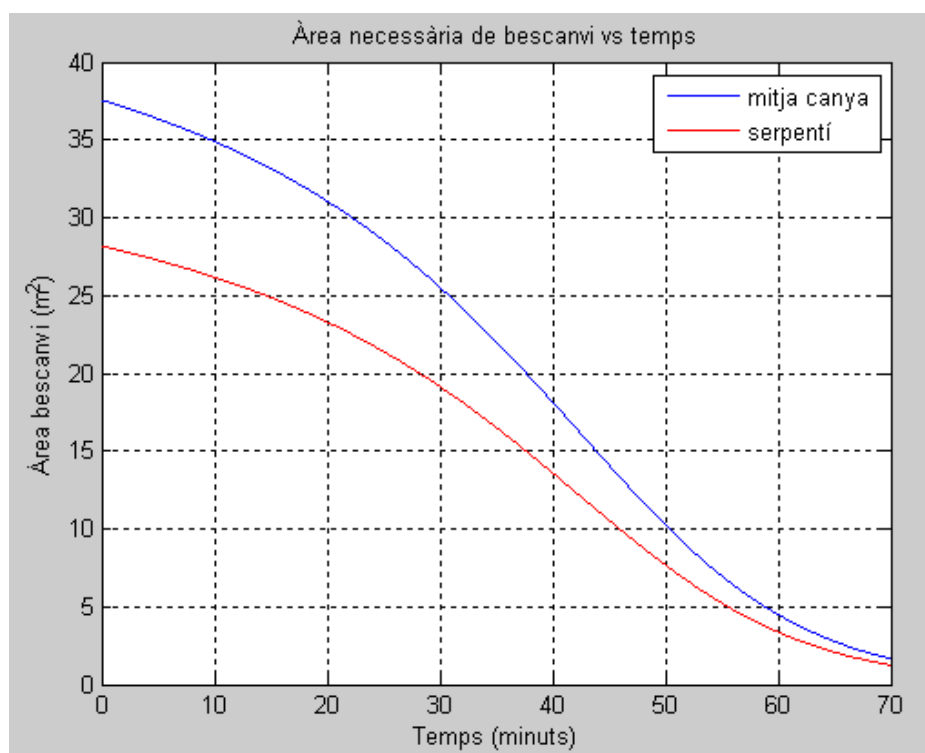


Figura 11.14. Àrea necessària de bescanvi en funció del temps per la mitja canya i pel serpenti

Tot i que en la figura 11.5 es mostri que l'àrea de bescanvi disminueix amb el temps, aquesta és la necessària ja que l'àrea serà constant al valor màxim que equival a 37.58 m² per la mitja canya i a 28.18 m² pel serpenti. Aleshores, l'àrea total de bescanvi serà la suma de les dues, és a dir, 65.76 m².

g) Velocitat dels refrigerants

La velocitat del refrigerant v es determina:

$$v = Q \cdot A_{pas} \left(\frac{m}{s} \right)$$

On:

Q = cabal volumètric del refrigerant = m/ρ (m³/s)

ρ = densitat de l'aigua = 1000 kg/m³

A_{pas} = àrea de pas (m²)

Per calcular l'àrea de pas dels dos bescanviadors abans cal saber el diàmetre intern per on circula l'aigua. Els diàmetres escollits són els següents:

$$d_{i,1/2 \text{ canya}} = 80 \text{ mm}$$

$$d_{i, \text{serpentí}} = 80 \text{ mm}$$

Si ambdós diàmetres són iguals, l'àrea de pas de la mitja canya serà la meitat que la del serpentí tal i com es mostra a continuació.

$$A_{pas,1/2 \text{ canya}} = \frac{\pi}{8} \cdot d_{i,1/2 \text{ canya}}^2 = 0,0025 \text{ m}^2$$

$$A_{pas, \text{serpentí}} = \frac{\pi}{4} \cdot d_{i, \text{serpentí}}^2 = 0,0050 \text{ m}^2$$

Ara ja sí, substituint tots els paràmetres es pot trobar la velocitat del refrigerant que varia amb el temps degut a que també ho fa el cabal.

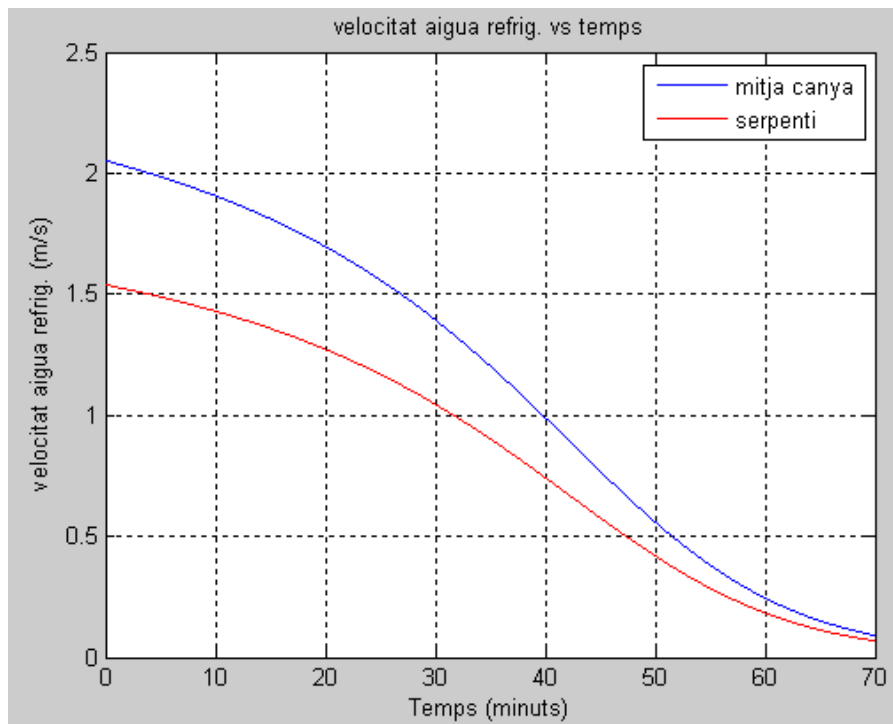


Figura 11.15. Velocitat del refrigerant de la mitja canya i del serpentí respecte al temps.

Com que el cabal és proporcional a la velocitat, aquesta també disminueix amb el temps. S'aconsegueix un valor màxim de 2.05 m/s per la mitja canya i un valor màxim de 1.54 m/s pel serpentí. Cal comentar però, que els fluids mai circularan a la velocitat mínima de 0.7 m/s ja que al minut 40 es deixarà de circular aigua per la mitja canya de manera que tot el calor serà absorbit pel serpentí fent augmentar la seva velocitat i per tant el seu cabal.

h) Dimensions dels bescanviadors

- SERPENTÍ:

$$d_i = 80 \text{ mm}$$

$$x = \text{gruix del serpentí} = 2 \text{ mm}$$

$$d_e = d_i + 2 \cdot x = 84 \text{ mm}$$

$$A_{\text{Besc, serpentí}} = \text{àrea de bescanvi màxima necessària del serpentí} = 28.18 \text{ m}^2$$

$$L_{\text{serpentí}} = \text{longitud del serpentí} = A_{\text{Besc, serpentí}} / (\pi \cdot ((d_i + d_e)/2)) = 109.4 \text{ m}$$

$$R = \text{radi de la hèlix del serpentí} = (0.9 \cdot d)/2 = 1.35 \text{ m, on } d = \text{diàmetre del reactor} = 3 \text{ m}$$

$$n = \text{número de voltes del serpentí} = L_{\text{serpentí}} / (2 \cdot \pi \cdot R) = 13$$

$$e = \text{espaiat entre volta i volta del serpentí} = \frac{[h - n \cdot d_e] - [(2 \cdot 0.1 \cdot h)]}{n} = 19.5 \text{ cm}$$

$$V_{\text{serpentí}} = \text{Volum del serpentí} = L_{\text{serpentí}} \cdot \frac{\pi}{4} \cdot (d_{i, \text{serpentí}} + 2 \cdot x)^2 = 0.60 \text{ m}^3$$

- MITJA CANYA:

$$d_i = 80 \text{ mm}$$

$$x = \text{gruix de la mitja canya} = 2 \text{ mm}$$

$$d_e = d_i + 2 \cdot x = 84 \text{ mm}$$

$$A_{\text{Besc, 1/2canya}} = \text{àrea de bescanvi màxima necessària de la mitja canya} = 37.58 \text{ m}^2$$

$$L_{1/2\text{canya}} = \text{longitud de la mitja canya} = A_{\text{Besc},1/2\text{canya}} / (\pi \cdot ((d_i + d_e)/2)) = 146 \text{ m}$$

$$d_{e,\text{cilindre}} = 3,08 \text{ m}$$

$$n = \text{número de voltes del serpentí} = L_{1/2\text{canya}} / (\pi \cdot d_{e,\text{cilindre}}) = 15 \text{ voltes}$$

$$h_{\text{cil}} = 3.9 \text{ m}$$

$$e = \text{espaiat entre volta i volta de la mitja canya} = (h_{\text{cil}} - n \cdot d_{e,1/2\text{canya}}) / n = 0.18 \text{ m}$$

$$V_{1/2\text{canya}} = \text{Volum de la mitja canya} = L_{1/2\text{canya}} \cdot A_{\text{pas},1/2\text{canya}} = 0.37 \text{ m}^3$$

11.9.3.4 Disseny mecànic.

S'utilitza com a base pel càlcul dels gruixos del reactor la normativa ASME que defineix les equacions a seguir en gruixos de cossos cilíndrics i dels seus fons per tal de garantir seguretat en l'operació i no sobredimensionar l'equip.

Per tal càlcul es divideix el reactor en un cos cilíndric i en dos fons toricsfèrics (superior i inferior).

- Cos cilíndric:

$$t = \frac{PR}{SE - 0.6P} + C_1 + C_2$$

On:

t= gruix del cilindre (mm)

P = pressió de disseny (atm)

R = radi intern del cilindre = d/2 = 1500 mm

E = factor de soldadura

S = límit elàstic (N/mm²)

C₁ = sobreessessor per corrosió (mm)

C₂ = tolerància a la fabricació (mm)

La pressió de disseny es determina a partir de la pressió d'operació interna corresponent a la pressió de l'hidrogen.

$$P = P_{op} + h g \rho$$

On:

$$P_{op} = 3 \text{ MPa} = 29.6 \text{ atm}$$

$$h = \text{altura de la columna de líquid} = \text{alçada del reactor} = 4.5 \text{ m}$$

$$g = \text{gravetat} = 9.81 \text{ m/s}^2$$

$$\rho = \text{densitat de la mescla a tractar} = 789 \text{ kg/m}^3$$

$$P = 29.6 \text{ atm} + \frac{(4.5 \cdot 9.81 \cdot 789)}{101325} = 30 \text{ atm}$$

S'estableix el factor de soldadura $E = 0.85$ equivalent al d'una soldadura amb radiografiat parcial, i es determina el límit elàstic a partir de la temperatura de disseny i del material de l'equip mitjançant la taula 11.14 de la bibliografia (Sinnot, 1983).

Taula 11.14. Valors d'el límit elàstic per diferents temperatures de disseny i materials utilitzats.

Material	Tensile strength (N/mm ²)	Design stress at temperature °C (N/mm ²)									
		0 to 50	100	150	200	250	300	350	400	450	500
Carbon steel (semi-killed or silicon killed)	360	135	125	115	105	95	85	80	70		
Carbon-manganese steel (semi-killed or silicon killed)	460	180	170	150	140	130	115	105	100		
Carbon-molybdenum steel, 0.5 per cent Mo	450	180	170	145	140	130	120	110	110		
Low alloy steel (Ni, Cr, Mo, V)	550	240	240	240	240	240	235	230	220	190	170
Stainless steel 18Cr/8Ni unstabilised (304)	510	165	145	130	115	110	105	100	100	95	90
Stainless steel 18Cr/8Ni Ti stabilised (321)	540	165	150	140	135	130	130	125	120	120	115
Stainless steel 18Cr/8Ni Mo 2½ per cent (316)	520	175	150	135	120	115	110	105	105	100	95

El material escollit pel reactor és acer inoxidable AISI 304 i la temperatura de disseny 100°C, considerant un augment de 20°C en la temperatura d'operació com a factor de seguretat. Amb això s'obté un límit elàstic de $145 \text{ N/mm}^2 = 1431 \text{ atm}$.

Ja per últim, el sobreessessor per corrosió i la tolerància a la fabricació es consideren d'1mm cadascun.

Un cop sabent totes les dades necessàries pel càlcul del gruix del cilindre es troba que $t=39.49 \text{ mm}$ però al existir sols gruixos de mil·límetres exactes s'escull 40 mm.

- Fons torisfèric

A continuació es figura la forma pertanyent a un fons torisfèric:

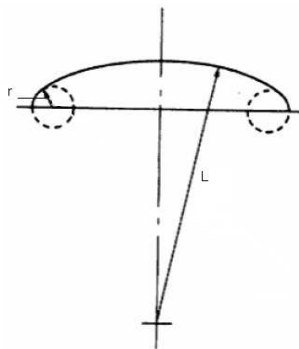


Fig. 11.16. Formes d'un fons torisfèric.

On:

r = radi del torus , L = radi de l'esfera = diàmetre del cilindre

Ara bé, segons el ratio r/L que s'utilitzi l'equació per determinar el gruix del fons torisfèric serà diferent. Escollint doncs un ratio r/L de 0.1 l'equació a seguir és:

$$t = \frac{0.885PL}{SE - 0.1P} + C_1 + C_2$$

Els valors de P, S, E i C₁ i C₂ seran els mateixos que en el cos cilíndric.

Substituint els respectius valors s'obté un gruix de 67.54 mm que s'arrodoneix a 68 mm.

j) Pes del reactor

- Pes cilindre:

$$P_{cil} = \frac{\pi}{4} \cdot (D + 2t^2 - D^2) \cdot h_{cil} \cdot \rho_{acer}$$

On:

D = diàmetre del cilindre = 3 m

t = gruix del cos cilíndric = 40 mm

h_{cil} = alçada del cilindre (m)

ρ_{acer} = densitat de l'acer inoxidable AISI 304 = 7850 kg/m³

Es suposa l'alçada del fons toricsfèrics inferior i superior amb un total de 60 cm, i així, l'alçada del cilindre serà la resta de l'alçada del reactor menys les alçades dels fons.

$$h_{cil} = 4.5 - 0.6 = 3.9 \text{ m}$$

Amb totes les dades conegudes s'obté un pes de 11696 kg.

- Pes fons toricsfèric:

Per calcular el pes de la xapa dels fons toricsfèrics es parteix de les següents fórmules tal i com s'ha vist en equips anteriors.

$$V_{tor,ext} = 0,0809 \cdot d_{e,cil}^3 = 1,28 \text{ m}^3$$

$$V_{tor,int} = 0,0809 \cdot d_{i,cil}^3 = 1,26 \text{ m}^3$$

$$V_{xapa \text{ tor}} = V_{tor,ext} - V_{tor,int} = 0,02 \text{ m}^3$$

Sabent que la densitat del material (AISI 304) és de 7850 kg/m^3 és calcula el pes de la xapa toriesfèrica:

$$Pes_{tor} = \rho V_{xapa\ tor} = 143,6 \text{ kg}$$

k) Agitador:

Dins del disseny de l'agitador és important conèixer la potència necessària per disposar de l'agitació requerida, la qual ve definida per la següent equació:

$$P = Np \cdot N^3 \cdot d_2^5 \cdot \rho$$

On: P: Potència necessària per l'agitador (W)

Np: Número de potència

d_2 : Diàmetre de l'agitador (m)

N: revolucions de l'agitador (rps)

ρ : densitat del fluid (Kg/m^3)

Per tal d'obtenir el número de potència s'utilitza l'equació de Reynolds:

$$Re = \frac{N \cdot d_2^2 \cdot \rho_A}{\mu_A}$$

On: μ = Viscositat del fluid ($\text{kg/m}\cdot\text{s}$)

N = 130 rpm

La viscositat de la mescla és d'aproximadament $4,52 \cdot 10^{-4} \text{ kg/ms}$ i la seva densitat és de 789 Kg/m^3 . Amb aquestes dades es calcula el Reynolds:

$$Re = 3,78 \cdot 10^6$$

Amb el valor del Reynolds es pot trobar com en altres apartats el nombre de potència per a l'agitador desitjat. En aquest cas s'obté un valor $N_p = 5$ i es calcula la potència necessària per a l'agitador:

$$P = 40,13 \text{ KW}$$

Per tal d'analitzar aquesta potència de manera qualitativa es passa a dividir el valor entre el volum del reactor. De tal manera que:

$$\frac{\text{Potència agitador}}{\text{Volum de reacció}} = \frac{40,13 \text{ kW}}{27 \text{ m}^3} = 1,48 \text{ kW/m}^3$$

Aquest valor indica que l'agitació és moderada, de manera que s'assumeix un disseny correcte de l'agitador.

l) Càlcul del pes de l'agitador:

$$Pes_{agitador} = V_{agitador} \cdot \rho_{agitador}$$

11.9.4. Reactor de l'acetilació del p-aminofenol

11.9.4.1 Expressió de la constant cinètica, K.

Al tractar-se d'un reactor adiabàtic la temperatura d'operació no és constant sinó que varia amb el temps, per aquest motiu cal trobar l'expressió de la constant cinètica en funció de la temperatura. Per a la seva determinació es parteix dels articles següents:

- 1) Preparation of N-acetyl-p-aminophenol. D. W. Young, homewood. December 3, 1963. United States Patent 3,113,150.
- 2) Acetaminophen: The acetylation of p-aminophenol. J. Jeffers. Ouachita Baptist University. CER - Modular Laboratory Program in Chemistry, SYNT 746.

Condicions a les que treballen:

1)

T = temperatura d'operació = 60°C

X = grau de conversió = 0.67

t = temps de reacció = 5 minuts = 300 segons

A_o = concentració inicial de p-aminofenol = 7.76 M

B_o = concentració inicial d'anhídrid acètic = 8.54 M

2)

T = temperatura d'operació = 110°C

X = grau de conversió = 0.99

t = temps de reacció = 15 minuts = 900 segons

A_o = concentració inicial de p-aminofenol = 2.22 M

B_o = concentració inicial d'anhídrid acètic = 2.89 M

El balanç de matèria del reactor (RDTA) tenint en compte que el reactiu limitant és el p-aminofenol és:

$$t = \frac{-A_o}{\vartheta_A} \int_0^X \frac{dX}{r(X)}$$

Suposant cinètica elemental de segon ordre es dedueix l'expressió de la velocitat de reacció:

$$r = K \cdot A_o \cdot B_o = K \cdot (A_o - A_o \cdot X)(B_o - A_o \cdot X)$$

Així, l'expressió final del balanç resulta:

$$t = \frac{-A_o}{\vartheta_A} \int_0^X \frac{dX}{K \cdot (A_o - A_o \cdot X)(B_o - A_o \cdot X)} \quad (s)$$

Segons l'equació anterior, l'única incògnita a determinar és la constant cinètica però el fet de tenir una integral la seva resolució no és fàcil. Per això, s'elabora un programa amb el matlab que sigui capaç de trobar tal valor substituint les dades conegudes. Els resultats són:

1)

$$300 = \frac{7,76}{1} \int_0^{0,67} \frac{dX}{K \cdot (7,76 - 7,76 \cdot X)(8,54 - 7,76 \cdot X)} \rightarrow K_1 = 7,27 \cdot 10^{-4} \frac{m^3}{kmol \cdot s}$$

2)

$$900 = \frac{2,22}{1} \int_0^{0,99} \frac{dX}{K \cdot (2,22 - 2,22 \cdot X)(2,89 - 2,22 \cdot X)} \rightarrow K_2 = 18,98 \frac{m^3}{kmol \cdot s}$$

Mitjançant aquestes dues constants cinètiques trobades i les temperatures d'operació respectives, hom pot trobar, segons la linealització de l'equació d'Arrhenius i la representació dels dos punts coneguts ajustats a una recta, els paràmetres necessaris per deixar l'expressió de K en funció de la temperatura.

$$\text{Equació d'Arrhenius: } K = A \cdot \exp\left(\frac{-Ea}{RT}\right)$$

On:

A = constant d'Arrhenius

Ea = energia d'activació

R = constant del gas ideal

Linealització de l'equació d'Arrhenius: $\boxed{\ln K} = \ln A - \frac{E}{R} \cdot \boxed{\frac{1}{T}}$

$\downarrow$
y

$\downarrow$
x

Punts per construir la recta:

$$y_1 = \ln 7,27 \cdot 10^{-4}$$

$$y_2 = \ln 18,98$$

$$x_1 = 1/(60+273)$$

$$x_2 = 1/(110+273)$$

Equació de la recta resultant: $y = -25941x + 70,67$

On:

$$\text{Pendent} = -E_a/R = -25941$$

$$\text{Ordenada a l'origen} = \ln A = 70,67 \rightarrow A = \exp(70,67) = 4,93 \cdot 10^{30}$$

Substituint ambdós valors a l'equació d'Arrhenius s'obté l'expressió de K(T) desitjada:

$$\boxed{K = 4,93 \cdot 10^{30} \cdot \exp\left(\frac{-25941}{T}\right)}$$

Tot seguit, es mostra en la figura inferior la seva representació exponencial envers la T.

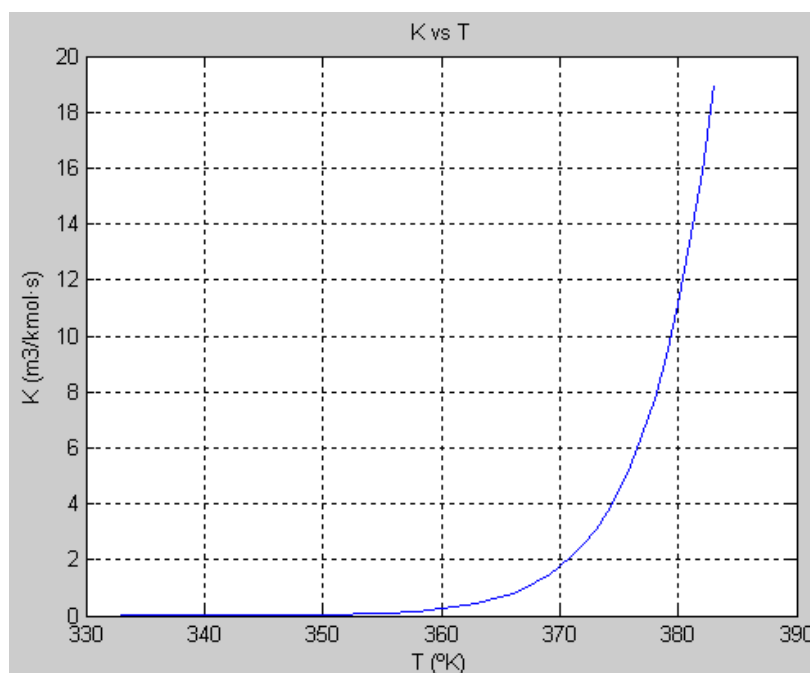


Figura 11.17. Representació de la constant cinètica enfront de la temperatura.

11.9.4.2 Volum del reactor.

Es suposa un volum de reacció escaient per produir un total de 20 tones de paracetamol al dia mitjançant 6 batchos.

Fent els càlculs necessaris es té que el volum de reacció ocupa 11 m^3 .

Comprovació:

$$N_c = C \cdot V \quad (\text{kmol})$$

On:

N_c = nº de mols de paracetamol

C = concentració de paracetamol final, kmol/m^3

V = volum de reacció = 11 m^3

Aleshores,

$$N_c = 2,177 \text{ kmol/m}^3 \cdot 11 \text{ m}^3 = 24 \text{ kmol paracetamol}$$

Sabent que el pes molecular del paracetamol és de 151,17 kg/kmol es calcula el nombre de tones al dia mitjançant 6 batchos.

$$24 \text{ kmol paracetamol} \cdot \frac{151,17 \text{ kg}}{\text{kmol}} \cdot \frac{1 \text{ Tn}}{1000 \text{ kg}} = 3,62 \text{ Tn/ batch}$$

$$3,62 \frac{\text{Tn}}{\text{batch}} \cdot \frac{6 \text{ batch}}{\text{dia}} = 21,72 \frac{\text{Tn}}{\text{dia}} \text{ paracetamol}$$

A fets reals, és possible que hi hagin pèrdues durant el procés per això és preferible tenir en compte 1.72 tones de més com a factor de seguretat.

c) Diàmetre, alçada i volum del reactor

Es calcula el diàmetre del reactor a partir del volum de reacció ($V=11\text{m}^3$) i s'aproxima a un valor exacte.

$$\text{diàmetre} \rightarrow d = \sqrt[3]{V \cdot 4 / (\pi \cdot 1,5)} = 2,1 \text{ m} \approx 2,5 \text{ m}$$

A partir del diàmetre anterior es troba l'alçada seguint la relació $h/d = 1,5$

$$Alç \cdot d \rightarrow h = 1,5 \cdot d = 1,5 \cdot 2,5 = 3,75 \text{ m}$$

Amb les dues dimensions conegudes es determina el volum del reactor segons:

$$V_{\text{reactor}} = \frac{\pi}{4} \cdot d^2 \cdot h = 18,4 \text{ m}$$

11.9.4.3 Balanç de matèria i energia.

- Grau d' conversió

Pel disseny de reactors no isotèrmics és necessari resoldre simultàniament les equacions de balanç de matèria i energia.

$$\text{Balanç de matèria: } \frac{dX}{dt} = \frac{-\vartheta_A}{A_o} \cdot r$$

$$\text{On: } r = K \cdot A_o \cdot B_o = 4,93 \cdot 10^{30} \cdot \exp\left(\frac{-25941}{T}\right) \cdot (A_o - A_o \cdot X)(B_o - A_o \cdot X)$$

$$\text{Balanç d'energia: } T = JX + T_o$$

Si es substitueix l'expressió de la temperatura del balanç d'energia dins l'expressió de la velocitat de reacció que engloba el balanç de matèria, s'aconsegueix trobar el perfil del grau de conversió.

$$\boxed{\frac{dX}{dt} = \frac{-\vartheta_A}{A_o} \cdot 4,93 \cdot 10^{30} \cdot \exp\left(\frac{-25941}{JX + T_o}\right) \cdot (A_o - A_o \cdot X)(B_o - A_o \cdot X)}$$

Les condicions inicials són:

A_o = concentració inicial de p-aminofenol = 2,18 M

B_o = concentració inicial de l'anhidrid acètic = 2,8 M

T_o = temperatura inicial = 60°C

N_{A_o} = kmols de p-aminofenol inicials = $A_o \cdot V = 2,18 \cdot 11 = 24$ kmols

N_{B_o} = kmols d'anhidrid acètic inicials = $B_o \cdot V = 2,8 \cdot 11 = 30,8$ kmols

El dissolvent d'aquest reactor consta d'un 90% d'aigua i un 10% d'àcid acètic. Les propietats necessàries d'ambdós són:

$$\rho_{aigua} = \text{densitat de l'aigua} = 1000 \text{ kg/m}^3$$

$$PM_{aigua} = \text{pes molecular de l'aigua} = 18 \text{ kg/kmol}$$

$$Cp_{aigua} = \text{calor específic de l'aigua} = 75,3 \text{ KJ/(kmol}\cdot^{\circ}\text{K)}$$

$$\rho_{acetic} = \text{densitat de l'àcid acètic} = 1049 \text{ kg/m}^3$$

$$PM_{acetic} = \text{pes molecular de l'àcid acètic} = 60,05 \text{ kg/kmol}$$

$$Cp_{acetic} = \text{calor específic de l'àcid acètic} = 123,3 \text{ KJ/(kmol}\cdot^{\circ}\text{K)}$$

Aleshores es calculen el nº de mols de cadascun per introduir-los al reactor inicialment.

$$N_{aigua} = V \cdot 0,9 \cdot \rho_{aigua} / PM_{aigua} = 550 \text{ kmols}$$

$$N_{acetic} = V \cdot 0,1 \cdot \rho_{acetic} / PM_{acetic} = 19,21 \text{ kmols}$$

El terme J del balanç correspon a:

$$J = \frac{N_{Ao} \cdot \Delta H}{\vartheta_A \sum_{j=1}^s N_{jo} \overline{Cp_j}}$$

On $N_{jo} \overline{Cp_j}$ que es tracta de l'energia inicial de la mescla (KJ/ $^{\circ}$ K) calculada segons:

$$N_{jo} \overline{Cp_j} = N_{Ao} Cp_A + N_{Bo} Cp_B + N_{aigua} Cp_{aigua} + N_{acetic} Cp_{acetic}$$

$$Cp_A = 150,42 \text{ KJ/(kmol}\cdot^{\circ}\text{K)}$$

$$Cp_B = 168,2 \text{ KJ/(kmol}\cdot^{\circ}\text{K)}$$

Substituint tots els valors s'obté que $N_{j0}\overline{C_p}$ és igual a 52572 KJ/°K.

Un altre terme que cal conèixer és ΔH , és a dir, l'entalpia de reacció calculada a partir de les entalpies de formació estàndard ΔH_f° de cada component a 1 atm i a 298°K.

Component	Δh_f° (KJ/mol)	Estat
p-aminofenol	-184,23	sòlid*
àcid anhidrid	-625	líquid
paracetamol	-353,1	líquid
àcid acètic	-484,78	líquid

*No s'ha trobat la seva entalpia de formació a l'estat líquid.

$$\Delta H = [(-353,1) + (-484,78)] - [(-184,23) + (-625)] = -28,65 \text{ KJ/mol} = -28650 \text{ KJ/Kmol}$$

Ara ja sí, sabent que el coeficient estequiomètric de l'aminofenol és de -1 es pot trobar J segons l'equació:

$$J = \frac{24 \cdot (-28650)}{-1 \cdot 52572} = 16,76 \text{ °K}$$

Un cop coneguts tots els paràmetres implicats en el balanç hom es disposa a representar l'evolució del grau de conversió en el temps de reacció de 10 minuts.

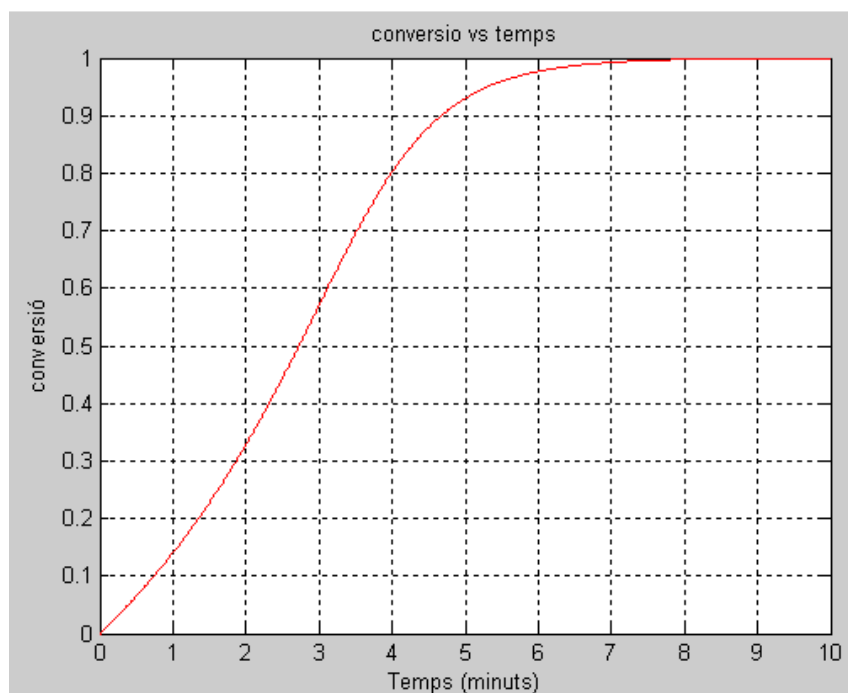


Figura 11.18. Representació del grau de conversió (referit al p-aminofenol) envers el temps de reacció.

Tal i com es mostra a la figura anterior el grau de conversió referit al p-aminofenol assoleix un valor final de 0,99, i per tant es pot concloure que tot el que entra al reactor és convertit.

- Perfil de concentracions

Un cop vist el perfil del grau de conversió, és interessant saber els perfils de les concentracions dels reactius i dels productes.

$$A = \text{Concentració de p-aminofenol} = A_o(1 - X)$$

$$B = \text{Concentració d'anhídrid acètic} = B_o - \frac{\vartheta_B}{\vartheta_A} \cdot A_o \cdot X$$

$$C = \text{Concentració de paracetamol} = C_o - \frac{\vartheta_C}{\vartheta_A} \cdot A_o \cdot X$$

$$D = \text{Concentració d'àcid acètic} = D_o - \frac{\vartheta_D}{\vartheta_A} \cdot A_o \cdot X$$

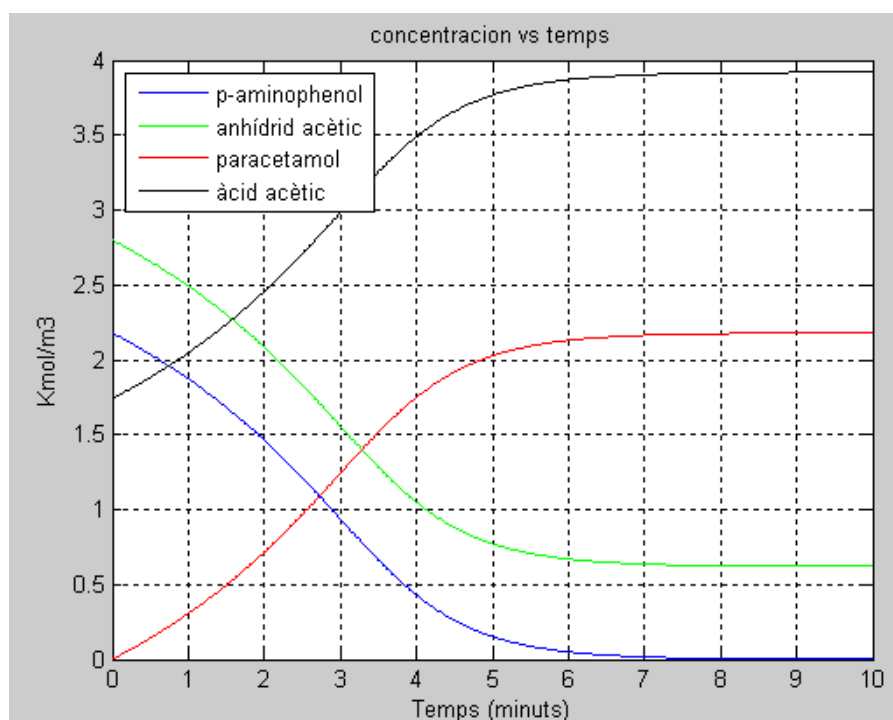


Figura 11.19. Representació de les concentracions envers el temps de reacció.

En la figura anterior es pot observar com la concentració dels reactius, p-aminofenol i anhídrid acètic, disminueixen durant el temps de reacció. Es disposa d'anhídrid acètic en excés i el que sobra ($0,62\text{M}$) acabarà reaccionant amb l'aigua per donar més àcid acètic. Així, els dos reactius seran esgotats totalment i la sortida d'àcid acètic serà la suma dels mols d'àcid acètic formats en la reacció principal més els mols formats posteriorment amb l'aigua i l'anhídrid acètic sobrant. A part d'això, es pot apreciar una concentració final de paracetamol de $2,18\text{M}$.

- Temperatura d'operació

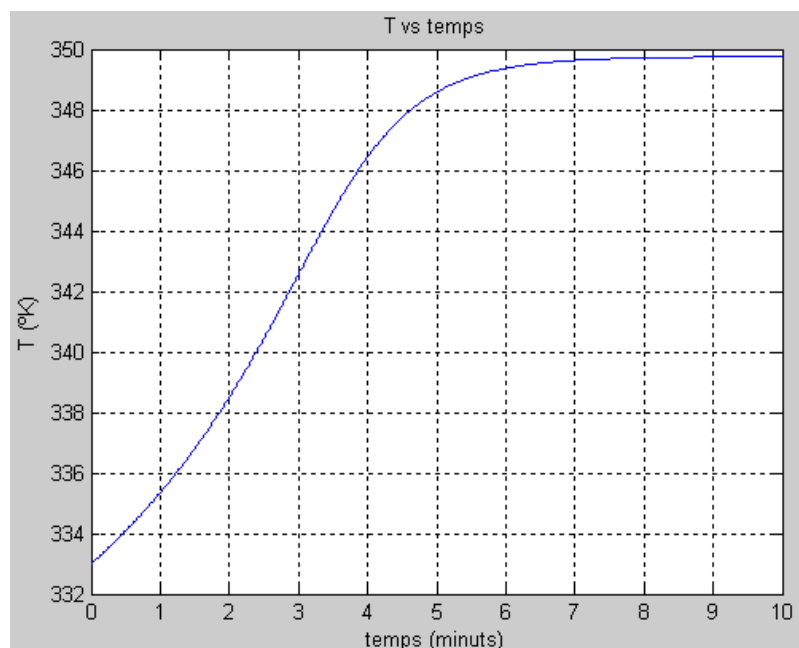


Figura 11.20. Evolució de la temperatura al llarg del temps.

Al ser un reactor adiabàtic la temperatura anirà variant amb el temps. Amb el gràfic anterior es pot conèixer el seu perfil, el qual partint de 60°C augmenta fins a 77°C.

11.10. CRISTAL·LITZADORS

Els cristal·litzadors presents a la planta consten d'un cos cilíndric amb un fons superior torisfèric i amb un fons inferior cònic. Per baixar la temperatura i aconseguir cristal·litzar el producte en qüestió es fa necessari l'ús d'una mitja canya, la qual es disposa en la superfície del cos cilíndric fins a l'altura del líquid a refredar.

Pel càlcul dels paràmetres de bescanvi com són el cabal de fluid refrigerant, l'àrea de bescanvi o el coeficient de transferència de calor, s'ha elaborat un script amb el matlab (veure pàgina 203) per tal que, les temperatures de sortida tant del refrigerant com de la

mescla siguin les desitjades mitjançant la combinació de les equacions del calor bescanviat.

$$q = mC_p\Delta T$$

$$q = AU\Delta T_{ML}$$

Els resultats obtinguts en cada un dels cristal·litzadors són:

1) Cristal·litzadors Z-401 i Z-402

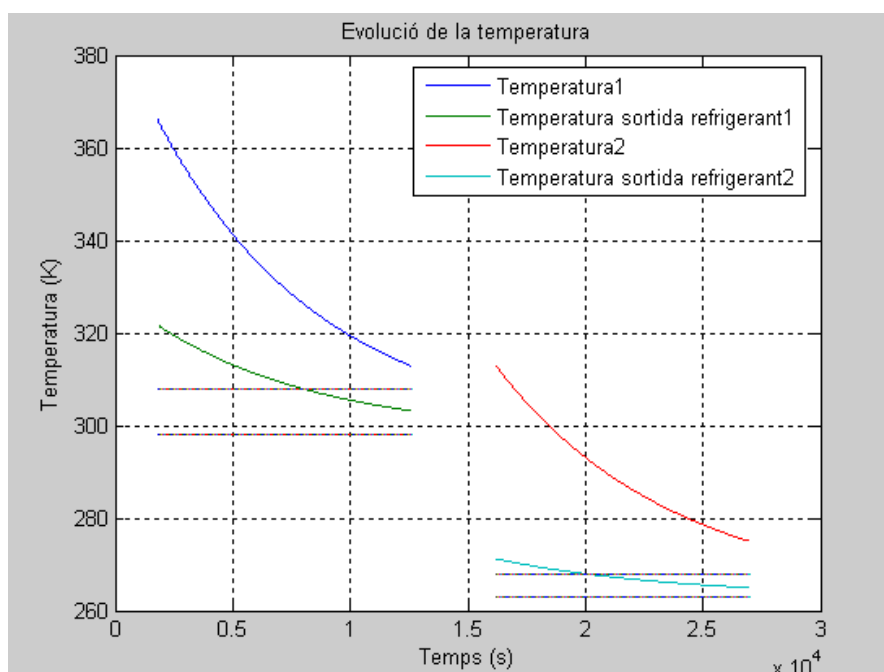


Figura 11.21. Perfil de temperatures dels fluids dels cristallitzadors Z-401 i Z-402.

Per tal d'entendre el gràfic es detalla què indica cada una de les línies representades:

- Temperatura1: perfil de temperatura de la mescla del cristallitzador Z-401 (de 93 a 45°C)
- Temperatura sortida refrigerant1: perfil de temperatura del refrigerant del cristallitzador Z-401 (de 25 a 40°C)
- Temperatura2: perfil de temperatura de la mescla del cristallitzador Z-402 (de 45 a 1°C)

-Temperatura sortida refrigerant2: perfil de temperatura del refrigerant del cristal·litzador Z-402 (de -10 a -5°C)

Les línies paral·leles indiquen que la temperatura de sortida del refrigerant ha d'estar dins d'aquest rang per poder ser introduït a la torre de refrigeració o al grup de fred.

- Cristal·litzadors Z-403 i Z-404

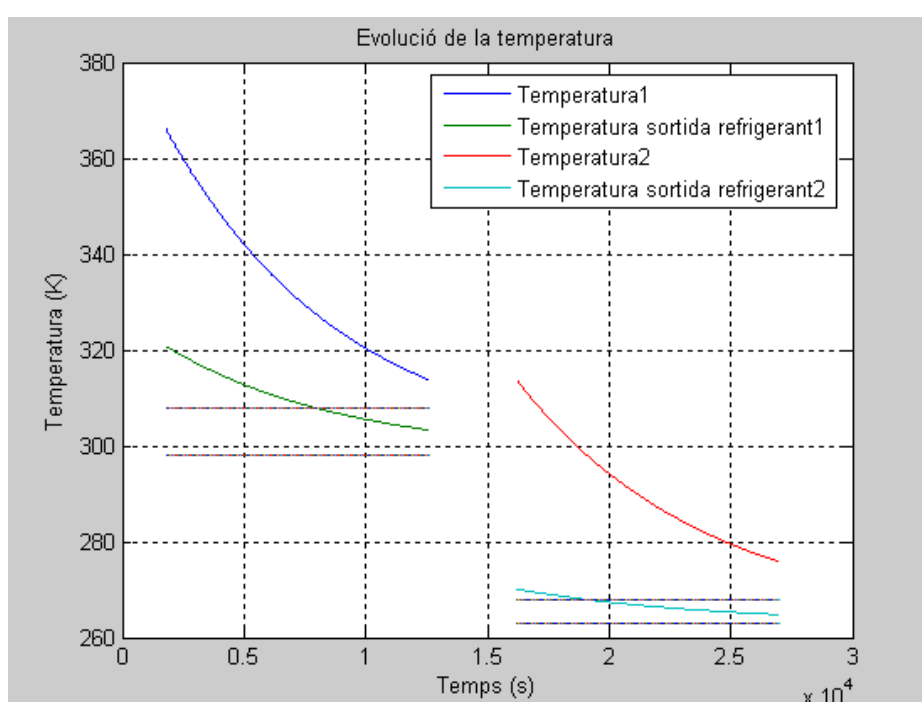


Figura 11.22. Perfil d' temperatures dels fluids dels cristallitzadors Z-403 i Z-404.

On:

-Temperatura1: perfil de temperatura de la mescla del cristallitzador Z-403 (de 93 a 45°C)

-Temperatura sortida refrigerant1: perfil de temperatura del refrigerant del cristallitzador Z-403 (de 25 a 40°C)

-Temperatura2: perfil de temperatura de la mescla del cristallitzador Z-404 (de 45 a 1°C)

-Temperatura sortida refrigerant2: perfil de temperatura del refrigerant del cristal·litzador Z-404 (de -10 a -5°C)

Les línies paral·leles indiquen que la temperatura de sortida del refrigerant ha d'estar dins d'aquest rang per poder ser introduït a la torre de refrigeració.

- Cristal·litzador Z-603

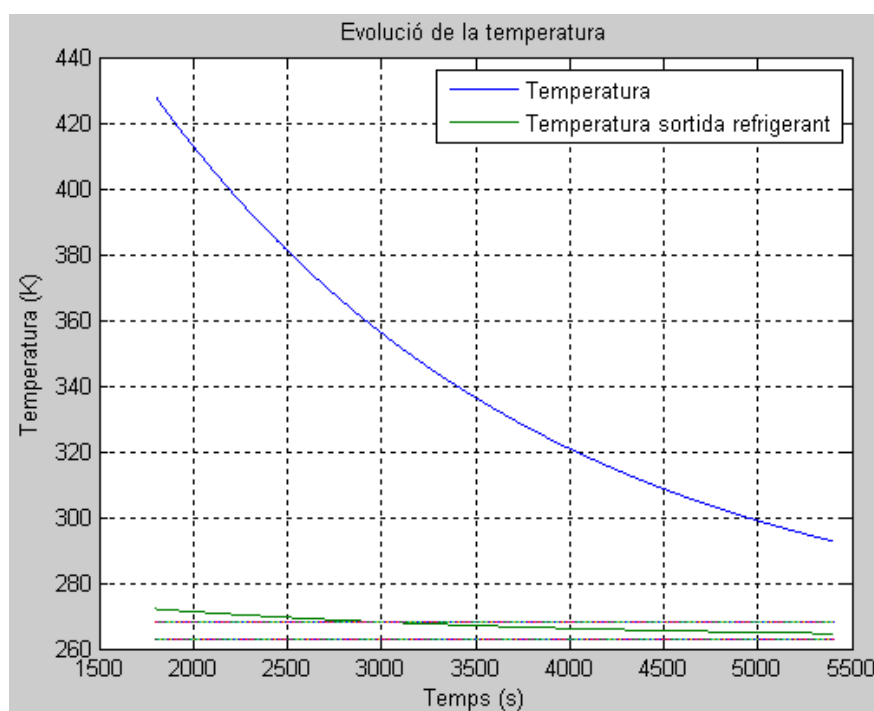


Figura 11.23. Perfil de temperatures dels fluids del cristallitzador Z-603.

On:

-Temperatura: perfil de temperatura de la mescla del cristallitzador Z-603 (de 155 a 20°C)

-Temperatura sortida refrigerant1: perfil de temperatura del refrigerant del cristallitzador Z-603 (de -10 a -5°C)

Les línies paral·leles indiquen que la temperatura de sortida del refrigerant ha d'estar dins d'aquest rang per poder ser introduït al chiller.

Dimensions del cristal·litzador

El procés a seguir és el següent i s'agafa com a exemple el Z-401.

- MITJA CANYA

Es suposa un diàmetre intern de mitja canya ($d_{i,m}$) i un gruix (t_m) i es calcula el seu diàmetre extern ($d_{e,m}$).

$$d_{i,m} = 80 \text{ mm}$$

$$x_m = 2 \text{ mm}$$

$$d_{e,m} = d_{i,m} + 2 \cdot t_m = 84 \text{ mm}$$

Es determina l'àrea de pas (A_{pas}) a partir del diàmetre intern.

$$A_{pas} = \frac{\pi}{8} \cdot d_{i,m}^2 = 3927 \text{ mm}^2 = 2,51 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$$

El fluid refrigerant és aigua i mitjançant el seu cabal i l'àrea de pas de la mitja canya es pot determinar la velocitat a la que circula.

$$v = \frac{m/\rho}{A_{pas}} = 1,6 \text{ m/s}$$

On:

m =cabal màssic del refrigerant = 4 kg/s

ρ = densitat del refrigerant = 1000 kg/m³

Tot seguit, sabent que l'àrea de bescanvi és de 10 m^2 es determina la longitud de la mitja canya (L_m) segons:

$$L_m = \frac{A_{besc}}{\pi \cdot \left(\frac{d_{i,m} + d_{e,m}}{2} \right)} = 38,82 \text{ m} \approx 39 \text{ m}$$

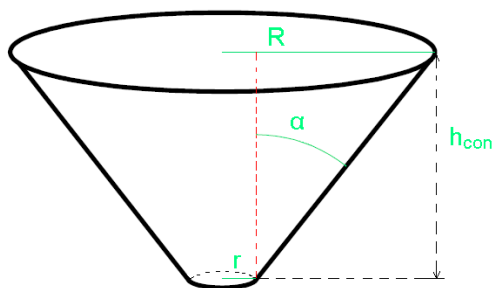
Es suposa un espaiat entre volta i volta (e), i es calcula el nombre de voltes de la mitja canya (n).

$$e = 4 \text{ cm}$$

$$n = \frac{L_m}{\pi \cdot d_{i,cil}} = 6,18 \approx 7 \text{ voltes}$$

- FONS CÒNIC

Per tal de calcular el volum del con es fixa el radi del con superior que equival al radi del cilindre ($R = 1\text{m}$), el radi del con inferior ($r = 0,1\text{m}$) i l'angle $\alpha = 70^\circ$ corresponent al de la figura següent.



Per trigonometria es troba que:

$$h_{con} = \frac{R - r}{\sin \alpha} = 0,33 \text{ m}$$

Així, el volum del con és:

$$V_{con} = \frac{1}{3} \pi (R^2 + r^2 + Rr) = 0,38 \text{ m}^3$$

- COS CILÍNDRIC

Si el líquid ocupa el volum del cilindre (envoltat per la mitja canya) més el volum del con, es pot determinar el volum de tal cilindre així:

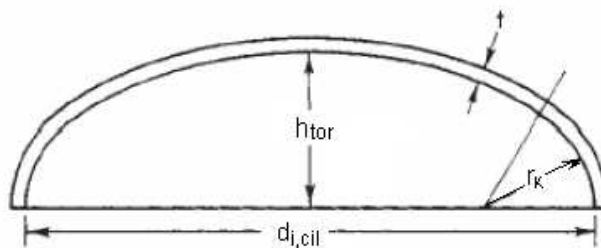
$$V_{cil} = V_{liq} + V_{con} = 9,10 - 0,38 = 8,72 \text{ m}^3$$

L'alçada del qual correspon a:

$$h_{cil} = \frac{V_{cil} \cdot 4}{\pi \cdot d_{i,cil}} = 2,78 \text{ m} \quad \text{on } d_{i,cil} = 2 \text{ m}$$

- CAPÇAL TORIESFÈRIC

El capçal toriesfèric té la següent forma:



Les seves dimensions es calculen segons:

$$V_{tor} = 0,0809 \cdot d_{i,cil}^3 = 0,65 \text{ m}^3$$

$$r_k = 0,1 \cdot d_{cil} = 0,2 \text{ m} \quad ; \quad h_{tor} = 0,193 \cdot d_{i,cil} = 0,39 \text{ m}$$

Així doncs, el volum aconseguit fins ara és:

$$V = V_{cil} + V_{con} + V_{tor} = 9,75 \text{ m}^3$$

Tenint en compte el volum anterior es sobredimensiona per deixar un petit espai mort dins el cristal·litzador.

$$V_{total} = 11 \text{ m}^3 \rightarrow V_{espaimort} = 11 - 9,75 = 1,25 \text{ m}^3$$

Aquest volum afegit, serà en forma de cilindre i per tant el seu diàmetre serà de 2 m i l'alçada es calcularà com:

$$h_{espaimort} = \frac{V_{espaimort} \cdot 4}{\pi \cdot d_{i,cil}} = 0,40 \text{ m}$$

Un cop això, ja es pot calcular l'alçada total del cristal·litzador segons:

$$h_{total} = h_{cil} + h_{con} + h_{tor} + h_{espaimort} = 3,90 \text{ m}$$

Per tal de calcular els gruixos i el pes es segueix la normativa ASME igual que en altres equips. Considerant que el cristal·litzador treballa a pressió atmosfèrica i que la temperatura de disseny és de 100°C s'obté:

Gruix cilindre: 6mm; Gruix con: 6mm; Gruix capçal toriesfèric: 4mm

Pes cilindre: 942,18 kg; Pes con: 53,61 kg; Pes capçal toriesfèric: 61,21 kg

Pes equip buit: 1257 kg; Pes equip en operació: 10364 kg.

Agitació

Segons la bibliografia s'ha trobat que per aquest tipus d'agitació el nombre de potència és de 2 amb una velocitat d'agitació de 30 rpm per tal de minimitzar incrustacions a la cara interna de les parets del cristal·litzador. Així, s'obté una potència d'agitació de 8 KW.

A continuació es mostren les dades obtingudes dels tots els cristal·litzadors:

Taula 11.15. *Paràmetres per a la dissolució dels cristallitzadors.*

Paràmetres	Z-401	Z-402	Z-403	Z-404
U (W/m ² °C)	600	500	600	500
densitat mescla (kg/m ³)	1000	1000	1000	1000
T _{ent} mescla (°C)	93	45	93	45
T _{sort} mescla (°C)	45	1	45	1
Volum mescla (m ³)	9,1066	9,1066	8,7	8,7
q (J/s)	1,45E+05	1,36E+05	1,24E+05	1,44E+05
Refrigerant	Aigua	Glicol 30%	Aigua	Glicol 30%
T _{ent} refrigerant (°C)	25	-10	25	-10
T _{sort} refrigerant (°C)	40	-5	40	-5
m _{refrigerant} (kg/s)	4	7	2	7
v _{refrigerant} (m/s)	1,6	2,8	1,4	1,8
A _{besc} (m ²)	10	17	6	16
d _{i,m} (mm)	80	80	60	100
x _m (mm)	2	2	2	2
Apas (m ²)	0,0025	0,0025	0,0014	0,0039
L _m (m)	39	68	32	51
e (cm)	40	40	40	40
n (voltes)	7	11	5	9
d _{cil} =d _{con gran} (m)	2	2	2	2
α	70°	70°	70°	70°
d _{con petit} (m)	0,2	0,2	0,2	0,2
h _{con} (m)	0,33	0,33	0,33	0,33
h _{cil} (m)	3,17	3,17	3,17	3,17
h _{tor} (m)	0,39	0,39	0,39	0,39
h total (m)	3,90	3,90	3,90	3,90
V cristallitzador (m ³)	11	11	11	11
Potència agitació (KW)	8	8	8	8
Gruix _{cilindre} (mm)	6	6	6	6
Gruix _{con} (mm)	6	6	6	6
Gruix _{toriesfèric} (mm)	4	4	4	4
Pes equip buit (kg)	1257	1257	1257	1257
Pes equip en operació (kg)	10364	10364	10364	10364

Paràmetres	Z-601	Z-602	Z-603
U (W/m²°C)	600	500	500
densitat mescla (kg/m³)	1227	1227	1024
T_{ent} mescla (°C)	77	40	155
T_{sort} mescla (°C)	40	20	20
Volum mescla (m³)	11	11	0,18
q (J/s)	1,33E+05	1,36E+05	1,23E+04
Refrigerant	Aigua	Glicol 30%	Glicol 30%
T_{ent} refrigerant (°C)	25	-10	-10
T_{sort} refrigerant (°C)	40	-5	-5
m_{refrigerant} (kg/s)	5	8	0,76
A_{besc} (m²)	14	12	0,32
d_{i,m} (mm)	80	100	20
x_m (mm)	2	2	0,5
A_{pas} (m²)	0,0025	0,0039	1,57E-04
L_m (m)	40	39	6
e (cm)	40	40	40
n (voltes)	7	7	4
d_{cil}=d_{con gran} (m)	2	2	0,5
α	70	70	70
d_{con petit} (m)	0,2	0,2	0,2
h_{con} (m)	0,33	0,33	0,055
h_{cil} (m)	3,81	3,81	1,48
h_{tor} (m)	0,39	0,39	0,097
h total (m)	4,53	4,53	1,63
V cristallitzador (m³)	13	13	0,3
Potència agitació (KW)	9,82	9,82	0,008
Gruix_{cilindre} (mm)	6	6	6
Gruix_{con} (mm)	6	6	6
Gruix_{toriesfèric} (mm)	4	4	4
Pes equip buit (kg)	1446	1446	165
Pes equip en operació (kg)	14943	14943	348

11.11. CONDENSADORS

Els condensadors de les columnes de destil·lació i dels flashos s'han dissenyat com un bescanviador de calor de carcassa i tubs seguint el mètode de Kern. L'objectiu d'aquests condensadors és tornar líquid el gas que surt de la columna, amb la qual cosa existeix un canvi de fase.

A continuació es mostren els passos realitzats pel disseny del condensador B-601 de la columna S-601.

- Procés de disseny

En dit condensador el fluid que circula per la carcassa és vapor d'aigua més àcid acètic i el fluid que passa pels tubs és aigua de torre tal i com s'ha esmentat anteriorment. Mitjançant les propietats d'ambdós fluids trobades en els paquets termodinàmics del programa HYSYS, es construeix la taula següent.

Taula 11.16. Propietats dels fluids del bescanviador de calor B-601.

Propietats	Tubs (aigua)			Carcassa (aigua + àc. Acètic)		
	ENTRADA	SORTIDA	MITJA LOG.	ENTRADA	SORTIDA	MITJA LOG.
Fase	L	L		G	L	
Temperatura (°C)	25	40	31,9	99,5	99,5	99,5
Pressió (atm)	1	1	1	1	1	1
Cabal màssic (kg/s)	63,23	63,23	63,23	2,41	2,41	2,41
Densitat (kg/m ³)	972	983	977,49	0,77	951,20	133,40
Viscositat (kg/ms)	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03	9,32E-06	5,41E-04	1,31E-04
C _p (J/kg°C)	4180	4180	4180	1826	3367	2518,41
Conductivitat (W/m°C)	0,67	0,65	0,66	0,02	0,58	0,17

1.-Balanz tèrmic

$$q = M_{S,L}C_{ps}(T_{S,1} - T_{S,2}) + \lambda_v M_{S,G} = m_t C_{pt}(T_{t,2} - T_{t,1})$$

On:

S= carcassa (shell), t= tubs

L= líquid, G=gas

1= entrada, 2=sortida

T= temperatura (°C)

M,m= cabal màssic (kg/s)

C_p= capacitat calorífica (J/kg°C)

q= calor bescanviat (W)

λ_v= calor de vaporització del fluid de la carcassa = 8.24·10⁵ J/kg

$$q = 0 + 8,247 \cdot 10^5 \cdot 2,41 = 1,98 \cdot 10^6 \text{ W}$$

$$m_t = \frac{q}{C_{pt}(T_{t,2} - T_{t,1})} = \frac{1,98 \cdot 10^6}{4180(40 - 25)} = 31,61 \text{ kg/s}$$

S'aplica un 5% de sobredimensionament a q amb el que s'obté $2,08 \cdot 10^6$ W.

2.- Càlcul de DTML

2.1.- Tipus de circulació

S'elegeix circular en contracorrent ja que té un millor bescanvi de calor. El gradient de temperatures (DTML) es troba segons:

$$DTML = \frac{(T_{S,1} - T_{t,2}) - (T_{S,2} - T_{t,1})}{\ln\left(\frac{T_{S,1} - T_{t,2}}{T_{S,2} - T_{t,1}}\right)} = \frac{(99,5 - 40) - (99,5 - 25)}{\ln\left(\frac{99,5 - 40}{99,5 - 25}\right)} = 66,7^\circ\text{C}$$

2.2.- Decisió del número de passos per carcassa i per tubs

S'inicia la iteració amb un pas per tubs i un pas per carcassa però al avançar en el disseny es requereix augmentar un pas més el nombre de passos per tub per tal que la velocitat del fluid dels tubs estigui compresa entre 1,5 i 2,5 m/s, marge idoni per aigua. Així, el nombre de passos per tub final és de 2 mantenint el nombre de passos per carcassa en 1.

3.- Correcció de DTML

Com que el gradient de temperatures és funció del número de passos per tubs, si es varia aquest número el DTML també s'ha de corregir, aconseguint un valor inferior al DTML inicial. Així doncs, per tal de trobar $(DTML)_{correctada}$ es parteix d'un factor de correcció (F) que s'avalua gràficament i és funció d'un paràmetre R i d'un paràmetre P.

$$R = \frac{T_{S,1} - T_{S,2}}{T_{t,2} - T_{t,1}} = \frac{99,5 - 99,5}{40 - 25} = 0$$

$$P = \frac{T_{t,2} - T_{t,1}}{T_{S,1} - T_{t,1}} = \frac{40 - 25}{99,5 - 25} = 0,201$$

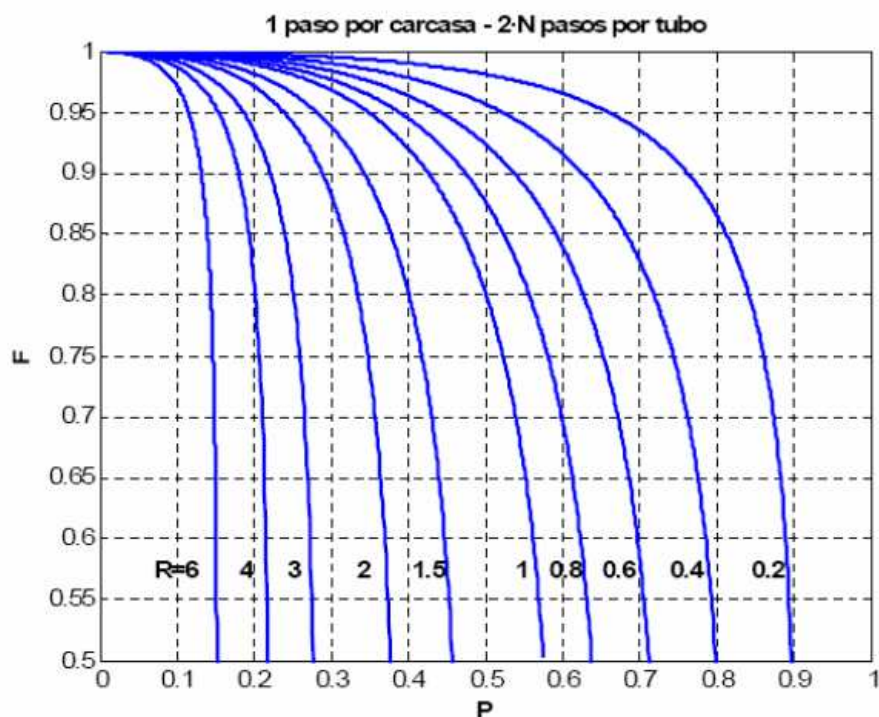


Figura 11.24. Correcció de la temperatura mitjana logarítmica per 1 pas per cascada i 2 o més passos per tub.

Aleshores, segons la gràfica anterior, $F=0,98$.

$$(DTML)_{\text{corregida}} = DTML \cdot F = 66,7 \cdot 0,98 = 65,4 \text{ }^{\circ}\text{C}$$

4.- Selecció del bescanviador

4.1.- Suposició del coeficient global inicial (U)

Es parteix d'un valor inicial obtingut a partir de la bibliografia sabent que el fluid de servei és aigua de torre i que el fluid de procés és una dissolució orgànica. El rang del coeficient global roman entre 400 i 800 $\text{W/m}^2\text{ }^{\circ}\text{C}$ i es pren un valor de 600 $\text{W/m}^2\text{ }^{\circ}\text{C}$.

Cal comentar que el valor final de U (punt 7) ha d'estar sobredimensionat respecte el suposat amb un valor màxim de sobredimensionament al voltant del 15%.

4.2.- Càlcul de l'àrea total de bescanvi (A)

$$A = \frac{q}{U(DTML)_{corregida}} = \frac{2,08 \cdot 10^6}{600 \cdot 65,4} = 53,08 \text{ m}^2$$

4.3.- Selecció de les característiques dels tubs

El diàmetre extern dels tubs escollit és de 18 mm tenint en compte que el rang típic sol oscil·lar entre 16 i 50 mm. El gruix de la paret es determina a partir de la pressió interna i del factor de corrosió i obté un valor de 1,5 mm. Com a conseqüència, el diàmetre intern dels tubs que s'obté és de 0,015 m.

La longitud (L) preferida dels tubs oscil·la entre els 6 i 16 peus (1,83 a 4,88 metres). Inicialment es comença iterant amb el valor mínim (1,83m) però finalment s'augmenta fins a 4,8 metres. Si es resta un mínim de 2,5 cm per cada costat per realitzar la connexió amb el capçal s'obté una L=4,75 m.

La relació entre la seva llargada i el diàmetre intern de la carcassa (Dis) ha d'estar dins el rang de 4 a 6, i segons el valor anterior s'aconsegueix que $L/Dis = 5,57$.

4.4.- Distribució dels tubs

El pitch, és a dir, la distància entre els centres de dos tubs consecutius es decideix distribuir-lo de manera triangular ja que és el que dona millors velocitats de transferència de calor i no necessita un sistema de neteja mecànica degut al baix embrutiment dels fluids. El pitch recomanat és de 1,25 vegades el diàmetre extern del tub, resolent això s'obté un pitch igual a 0,023.

4.5.- Carcasses

El diàmetre de la carcassa depèn del diàmetre del feix de tubs (D_b) i aquest alhora depèn del nombre de tubs, del pitch, i del nombre de passos per tubs.

Així doncs, es troba que en la iteració final per a 2 passos per tubs el número de tubs és:

$$N_t = \frac{A_{total}}{A_t} = 208$$

On :

N_t = Nombre de tubs

A_{total} = Àrea total de bescanvi (m^2)

D_E = Diàmetre extern dels tubs (m)

L = Longitud dels tubs (m)

El diàmetre del feix de tubs correspon a:

$$D_b = D_E \left(\frac{N_t}{K_1} \right)^{1/n_1} = 0,379 \text{ m}$$

On:

K_1 = Constant que per pitch triangular i 2 passos per tub val 0,249.

n_1 = Constant que per pitch triangular i 2 passos per tub val 2,207.

Per tal d'avaluar el diàmetre de carcassa D_s es selecciona una carcassa de tipus P i es llegeix gràficament el terme ($Dis-D_b$) amb el que s'obté un diàmetre intern de carcassa de 0,853 m.

Amb aquest valor obtingut, tal i com s'ha comentat anteriorment es comprova que L/Dis estigui comprès entre 4 i 6.

4.6.- Càlcul de la superfície de bescanvi d'un tub (A_t)

$$A_t = \pi D_E L = 0,27 \text{ m}^2$$

4.7.- Selecció del número de passos per tub npt mitjançant velocitats típiques

El rang de la velocitat típica del fluid de servei és entre 1,5 i 2,5 i el valor obtingut segons la fórmula roman dins del rang.

$$v_t = \frac{m_t}{\rho A_{pas1tub} N_{tp}} = 1,76 \text{ m/s}$$

On:

v_t = Velocitat per tubs (m/s)

ρ = Densitat del fluid per tubs (kg/m³)

$A_{pas1tub}$ = Àrea de pas d'un tub $= \frac{\pi}{4} D_I^2 = 1,77 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$

N_{tp} = Número de tubs per pas, número de tubs entre numero de passos per tub

$$N_{tp} = \frac{m_t}{\rho A_{pas1tub} v_{biblio}} = 123$$

On la v_{biblio} és igual a 1,5m/s.

Un cop això es comprova que el nombre de passos per tub correspon a 2, si no fos així s'hauria de corregir altre cop el DTML.

$$n_{pt} = \frac{N_t}{N_{tp}} = 1,7 \approx 2$$

4.8.- Determinació del nombre de pantalles deflectores i la separació entre elles

S'escull un Baffle cut del 25% i després d'unes quantes iteracions es troba un espaiat entre pantalles (l_b) de 0,4 per tal que els coeficients de transferència de calor i de la pèrdua de pressió que depenen d'aquest l_b estiguin dins dels seus rangs típics.

$$l_b = 0,4 \cdot D_s = 0,34$$

El número de pantalles deflectores es calcula amb la següent expressió:

$$\frac{L}{l_B} - 1 = 13$$

5.- Correcció del valor de U del bescanviador

Mitjançant el $(DTML)_{corregida}$ es rectifica el coeficient global de transmissió de calor segons:

$$U_{corregida} = \frac{q}{A(DTML)_{corregida}} = 570 \text{ W/m}^2\text{°C}$$

$$\text{On: } A = N_t \pi L D_E$$

6.- Determinació U del bescanviador a partir del càlcul dels coeficients individuals i factors d'embrutiment.

6.1 Coeficient de convecció costat tub

6.1.1. Determinació dels propietats físiques del fluid

Les propietats del fluid ja estan definides prèviament.

6.1.2. Secció dels pas

L'àrea de pas d'un tub i l'àrea de pas de tots els tubs (A_{pas_t}) són:

$$A_{pas1tub} = \frac{\pi}{4} D_I^2 = 1,77 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$$

$$A_{pas_t} = N_t \frac{A_{pas1tub}}{n_{pt}} = 1,83 \cdot 10^{-2} m^2$$

6.1.3. Diàmetre equivalent costat tubs (d_{eq}).

$$d_{eq} = D_I = 1,5 \cdot 10^{-2} m.$$

6.1.4. Càlcul màssic per unitat d'àrea. Densitat de flux màssic (G_{tub}).

$$G_{tub} = \frac{m_t}{A_{pas_t}} = 1720,11 kg/m^2s$$

6.1.5. Càlcul dels números de Reynolds i Prandtl

$$Re_t = \frac{D_I G_{tub}}{\mu} = 2,58 \cdot 10^4$$

$$Pr_t = \frac{C_p \mu}{k} = 6,32$$

6.1.6. Càlcul del factor de transferència de calor (j_h)

$$j_h = 0,027 \cdot Re_t^{-0,2} = 3,54 \cdot 10^{-3} \quad \text{ja que } Re > 10000$$

6.1.7. Càlcul del coeficient individual de transmissió de calor al costat dels tubs (h_t)

La correlació adient quan el fluid que circula per tubs és aigua correspon a:

$$h_t = 4200(1,35 + 0,02T) \frac{v_t^{0,8}}{D_I^{0,2}} = 3040 W/m^2 \text{ } ^\circ C$$

El valor anterior està dins del interval típic (1500-12000 W/m²°C) al tractar-se d'aigua sense canvi de fase.

6.2 Coeficient de convecció costat carcassa.

6.2.1. Càlcul d'Àrea transversal d'el·lipse (A_{ST})

$$A_{ST} = \frac{l_B D_S (\text{pitch} - D_E)}{\text{pitch} \cdot n_{ps}} = 0,058 \text{ m}^2$$

6.2.2. Càlcul de la massa per unitat d'àrea (G_S) i de la velocitat d'el·lipse (v_S)

$$G_S = \frac{M_S}{A_{ST}} = 41,34 \text{ kg/m}^2 \text{ s}$$

$$v_S = \frac{M_S}{A_{ST} \cdot \rho_S} = 0,4 \text{ m/s}$$

Es comprova que v_S es troba dins dels rangs típics (0,3-1)m/s.

6.2.3. Càlcul del diàmetre equivalent d'el·lipse (d_{eqS})

Amb pitch triangular el diàmetre equivalent és:

$$d_{eqS} = \frac{1,10}{D_E} (\text{pitch}^2 - 0,917 D_E^2) = 0,0128 \text{ m}$$

6.2.4. Càlcul del Reynolds d'el·lipse (Re_S)

$$Re_S = \frac{d_{eqS} G_S}{\mu_S} = 4,03 \cdot 10^3 \quad Pr_S = 1,91$$

6.2.5. Càlcul del coeficient individual de transmissió de calor (h_s)

$$h_s = \frac{k j_h Re_S Pr_S^{0,33}}{d_{eqS}} \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0,14}$$

Es troba el valor de j_h a partir de la figura següent, on depèn del nombre de Reynolds de carcassa i del Baffle cut.

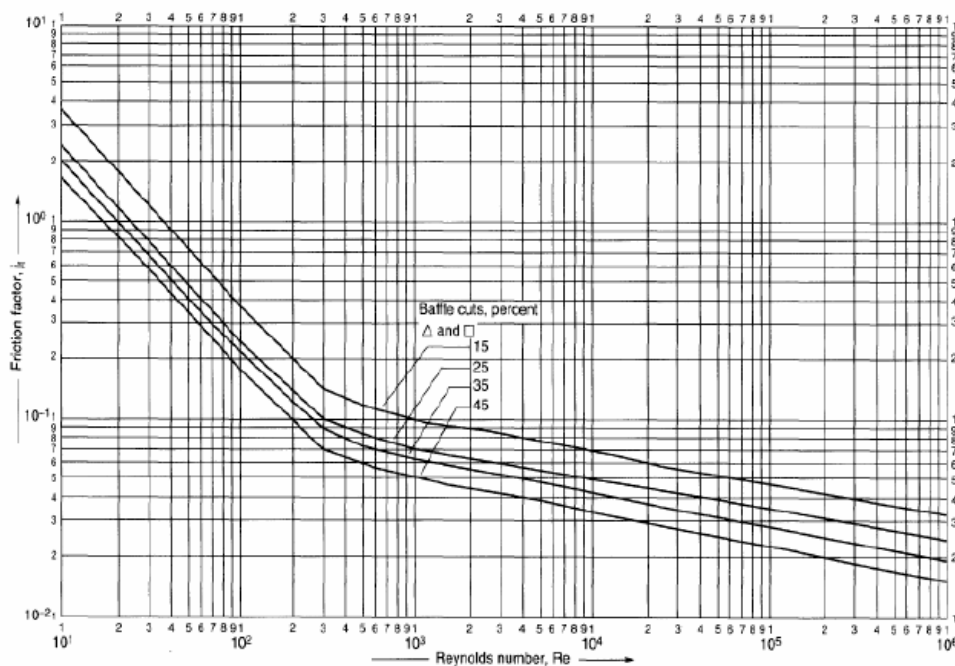


Figura 11. 25. Factor de transferència de calor per fluid de carcassa.

Trobat que $j_h = 0,058$, el terme h_s obté un valor de 3909,31 W/m²°C que està entre els valors típics corresponents a quan el fluid de procés és una solució orgànica.

7.- Càlcul del coeficient global U a partir dels coeficients individuals (en aquest cas referit a l'àrea externa) U_R

El material triat per els tubs és l'acer inoxidable, i la seva conductivitat calorífica és 44,935 W/m·s·°C.

El coeficient d'embrutiment per el cantó del tub es busca a la bibliografia (Sinnot, 1983), on es troba que pel fluid de servei que circularà pels tubs, un valor representatiu de coeficient d'embrutiment és $R_t = 3000 \text{ W/m}^2 \cdot ^\circ\text{C}$ i un valor típic per la mescla que circula per la carcassa serà $R_s = 3000 \text{ W/m}^2 \cdot ^\circ\text{C}$.

Així doncs, per trobar el valor real del coeficient global de transferència de calor (U_R), s'aplica l'expressió següent:

$$\frac{1}{U_R} = \frac{1}{h_s} + \frac{1}{R_s} + \frac{D_E \ln\left(\frac{D_E}{D_I}\right)}{2k} + \frac{D_E}{D_I} \frac{1}{R_t} + \frac{D_E}{D_I} \frac{1}{h_t}$$

Substituint tots els valors s'obté una $U_R = 704,03 \text{ W/m}^2 \cdot ^\circ\text{C}$. Aquest valor equival a un sobredimensionament d'un 14,78% del valor de U suposat, i per tant es dona per bo el disseny.

8.- Càlcul de les pèrdues de pressió

8.1 Costat tub

Per trobar les pèrdues de pressió es tenen en compte les contraccions i les expansions, i sabent que la viscositat és constant l'equació corresponent és:

$$\Delta P_t = N_p \left[8 \cdot j_f \left(\frac{L}{D_I} \right) + 2,5 \right] \frac{\rho v_t^2}{2}$$

On j_f és el factor de fricció pel fluid de tubs, que es pot avaluar mitjançant la figura següent.

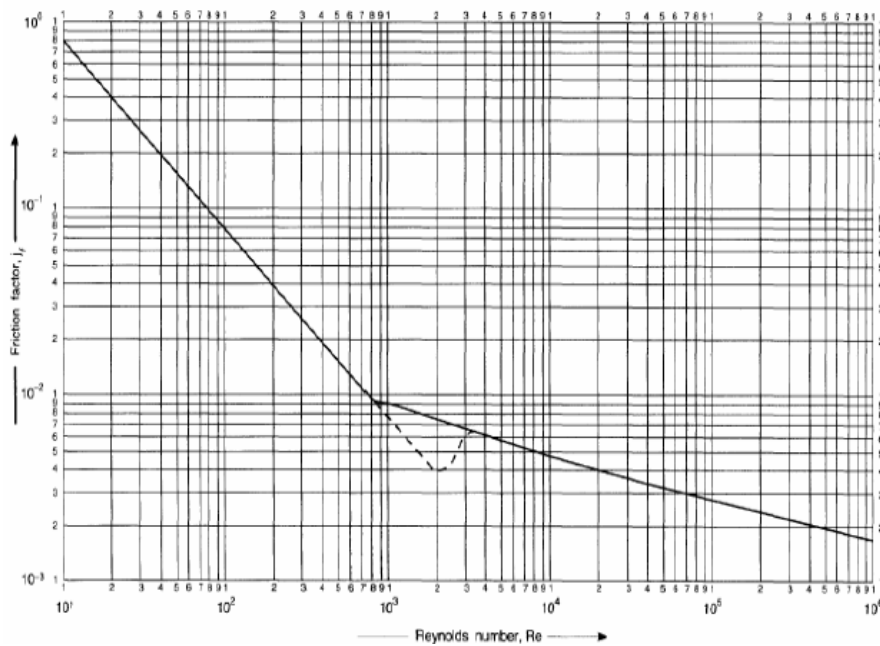


Figura 11.26. Factor de fricció pel fluid de tubs.

Tal i com es pot observar en la figura, el j_f aconsegueix un valor de $3,82 \cdot 10^{-3}$ el que representa una pèrdua de pressió de $7,57 \text{ KN/m}^2$.

8.2 Costat carcassa

Aquí, les pèrdues de càrrega es calculen segons:

$$\Delta P_S = n_t \cdot 8 \cdot j_f \left(\frac{D_S}{d_{eqS}} \right) \frac{L}{l_B} \frac{\rho v_t^2}{2} \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{-0,14}$$

On j_f és el factor de fricció pel fluid de carcassa, que es pot trobar a la figura següent.

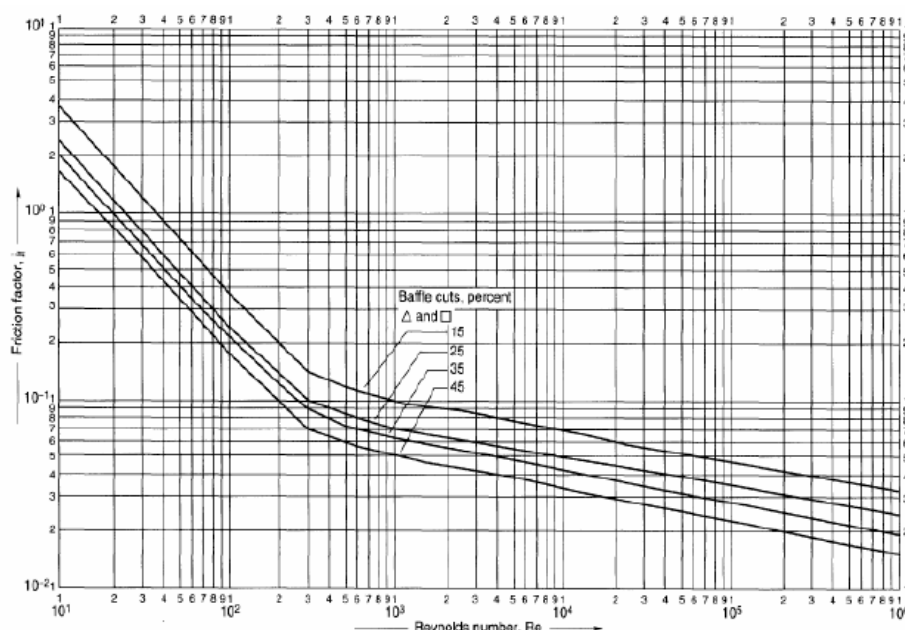


Figura 11.27. Factor d'fricció f fluid d'circulació.

Es troba que $j_f = 5,56 \cdot 10^{-2}$ i les pèrdues per pressió resulten ser de $4,45 \text{ KN/m}^2$.

Com que les pèrdues per pressió d'ambós fluids són inferiors a 35 KN/m^2 el disseny del condensador es dona com a bo.

A continuació es mostren les propietats de cada fluid present en cadascun dels condensadors així com una taula resum dels paràmetres necessaris pel seu disseny.

Taula 11.17. Propietats dels fluids del condensador B-301.

Propietats	Tubs (aigua)			Carcassa (nitric+aigua)		
	ENTRADA	SORTIDA	MITJA LOG.	ENTRADA	SORTIDA	MITJA LOG.
Fase	L	L		G	L	
Temperatura (°C)	25	40	31,9	91,1	89,1	90,1
Pressió (atm)	1	1	1	1	1	1
Caball màssic (kg/s)	12,10	12,10	12,10	0,60	0,60	0,60
Densitat (kg/m ³)	972	983	977,49	1,17	1167,00	168,77
Viscositat (kg/ms)	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03	9,54E-06	3,70E-04	9,86E-05
Cp (J/kg°C)	4180	4180	4180	1304	3104	2075,51
Conductivitat (W/m°C)	0,67	0,65	0,66	0,02	0,41	0,13

Taula 11.18. Propietats dels fluids del condensador B-303.

Propietats	Tubs (aigua)			Carcassa (aigua)		
	ENTRADA	SORTIDA	MITJA LOG.	ENTRADA	SORTIDA	MITJA LOG.
Fase	L	L		G	L	
Temperatura (°C)	-10	-5	-7,2	140,0	20,0	99,5
Pressió (atm)	1	1	1	0,4	1,0	0,4
Cabal màssic (kg/s)	17,37	17,37	17,37	0,07	0,07	0,07
Densitat (kg/m ³)	972	983	977,49	0,22	1011,00	119,89
Viscositat (kg/ms)	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03	9,95E-06	1,00E-03	2,15E-04
Cp (J/kg°C)	4180	4180	4180	1904	4204,00	2903,75
Conductivitat (W/m°C)	0,67	0,65	0,66	0,03	0,60	0,19

Taula 11.19. Propietats dels fluids del condensador B-401.

Propietats	Tubs (aigua)			Carcassa (vapor aigua + orto+dinitro)		
	ENTRADA	SORTIDA	MITJA LOG.	ENTRADA	SORTIDA	MITJA LOG.
Fase	L	L		G	L	
Temperatura (°C)	25,00	40,00	31,91	107,00	93,00	99,84
Pressió (atm)	1,00			2,00		
Cabal màssic (kg/s)	21,29	21,29	21,29	0,58	0,58	0,58
Densitat (kg/m ³)	972	983	977	1000	1000	1000
Viscositat (kg/ms)	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03	8,00E-04	8,00E-04	8,00E-04
Cp (J/kg°C)	4180	4180	4180	2010	2010	2010
Conductivitat (W/m°C)	0,67	0,65	0,66	0,67	0,65	0,66

Taula 11.20. Propietats dels fluids del condensador B-501.

Propietats	Tubs (aigua)			Carcassa (etanol+aigua)		
	ENTRADA	SORTIDA	MITJA LOG.	ENTRADA	SORTIDA	MITJA LOG.
Fase	L	L		G	L	
Temperatura (°C)	25	40	31,9	78,1	78,1	78,1
Pressió (atm)	1	1	1	1,0	1,0	1,0
Cabal màssic (kg/s)	51,97	51,97	51,97	4,58	4,58	4,6
Densitat (kg/m ³)	972	983	977,49	1,45	760,70	121,2
Viscositat (kg/ms)	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03	5,13E-03	4,37E-04	0,0
Cp (J/kg°C)	4180	4180	4180	1624	3598,00	2481,5
Conductivitat (W/m°C)	0,67	0,65	0,66	0,02	0,19	0,1

Taula 11.21. Taula resum per a disseny de condensors.

Paràmetres	B-301	B-303	B-401	B-501	B-601
q (W)	7,97E+05	3,81E+05	1,40E+06	3,42E+06	2,08E+06
DTMLc (°C)	56,19	71,53	66,15	44,29	65,4
Circulació	Contracorrent	Contracorr.	Contracorr.	Contracorr.	Contracorr.
U_{sup} (W/m ² °C)	400	600	600	600	600
A (m ²)	35,44	10,66	35,31	128,75	53,08
di tubs (m)	0,025	0,025	0,015	0,032	0,015
L tubs (m)	4,65	2,2	4,45	4,65	4,75
Tipus de Pitch	triangular	triangular	quadrat	triangular	triangular
Pitch	0,035	0,035	0,023	0,044	0,023
Nt	91	49	148	265	208
Db (m)	0,482	0,304	0,358	0,923	0,379
Dis (m)	1,059	0,4	0,811	1,94	0,853
At (m ²)	0,41	0,19	0,25	0,51	0,27
vt (m/s)	1,66	1,48	1,67	1,5	1,76
Apas1tub (m ²)	4,91E-04	4,91E-04	1,77E-04	8,04E-04	1,77E-04
Ntp	17	25	83	45	123
npt	6	2	2	6	2
Baffle cut (%)	25	25	25	25	25
lb	0,42	0,16	0,324	0,77	0,34
n° pantalles	10	13	13	5	13
U _c (W/m ² °C)	380,86	561,87	568,81	570,15	570
ht (W/m ² °C)	2622,74	1447,08	7953,51	7953,51	3040
vs (m/s)	0,5	0,5	0,3	0,3	0,4
hs (W/m ² °C)	806,91	3700	1717,61	1342,25	3909,31
U _R (W/m ² °C)	439,57	605	613,01	674,76	704,03
ΔP _t (KN/m ²)	34,85	10,75	32	16,43	7,57
ΔP _s (KN/m ²)	6,6	1,78	19,78	1,85	4,45

11.11. REBOILERS

De la mateixa manera que els condensadors, seguint el mètode de kern, es calculen les dimensions dels reboilers presents en les columnes de destil·lació i del flash.

Taula 11.22. Propietats dels fluids del reboiler B-302.

Propietats	Tubs (aigua)			Carcassa (nitric+aigua)			
	ENTRADA	SORTIDA	MITJA LOG.	ENTRADA	SORTIDA	SORTIDA	MITJA LOG.
Fase	G	G		L	G	L	
Temperatura (°C)	160	145	152,4	101,7	112,8	112,8	107,15
Pressió (atm)	1	1	1	1	1	1	1,00
Cabal màssic (kg/s)	20,75	20,75	20,75	0,77	0,36	0,41	0,58
Densitat (kg/m ³)	972	983	977,49	1261,00	0,57	1669	1455,48
Viscositat (kg/ms)	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03	5,71E-04	9,50E-06	1,34E-03	9,03E-04
Cp (J/kg°C)	4180	4180	4180	2987	2064	1956	2435,23
Conductivitat (W/m°C)	0,67	0,65	0,66	0,59	0,03	0,38	0,48

Taula 11.23. Propietats dels fluids del condensador B-502.

Propietats	Tubs (aigua)			Carcassa (etanol+aigua)			
	ENTRADA	SORTIDA	MITJA LOG.	ENTRADA	SORTIDA	SORTIDA	MITJA LOG.
Fase	G	G		L	G	L	
Temperatura (°C)	160	145	152,4	80,4	85,6	85,63	83,0
Pressió (atm)	1	1	1	1	1	1	1,0
Cabal màssic (kg/s)	44,31	44,31	44,31	2,09	1,88	0,21	0,8
Densitat (kg/m ³)	972	983	977,49	845,50	0,03	922,3	883,3
Viscositat (kg/ms)	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03	4,37E-04	8,38E-06	3,75E-04	0,0
Cp (J/kg°C)	4180	4180	4180	3790	1748	4044	3915,6
Conductivitat (W/m°C)	0,67	0,65	0,66	0,38	0,02	0,5821	0,5

Taula 11.24. Propietats dels fluids del condensador B-601.

Propietats	Tubs (aigua)			Carcassa (vapor aigua + àc. Acètic)			
	ENTRADA	SORTIDA	MITJA LOG.	ENTRADA	SORTIDA	SORTIDA	MITJA LOG.
Fase	G	G		L	G	L	
Temperatura (°C)	160	145	152,4	117,9	154,6	154,6	135,42
Pressió (atm)	1	1	1	1	1	1	1,00
Cabal màssic (kg/s)	65,82	65,82	65,82	9,33	9,32	0,01	1,41
Densitat (kg/m ³)	972	983	977,49	949,10	1,74	1023	985,59
Viscositat (kg/ms)	1,00E-03	1,00E-03	1,00E-03	2,71E-04	8,67E-06	3,23E-04	0,00
Cp (J/kg°C)	4180	4180	4180	1727	1428	1887	1805,82
Conductivitat (W/m°C)	0,67	0,65	0,66	0,14	0,02	0,1189	0,13

Taula 11.25. *Resum dels paràmetres de disseny dels rebollers.*

Paràmetres	B-302	B-502	B-602
q (W)	1,37E+06	2,92E+06	4,33E+06
DTMLc (°C)	44,32	68	58,91
Tipus circulació	Contracorrent	Contracorrent	Paral·lel
U suposat (W/m ² °C)	600	800	800
A (m ²)	51,37	53,63	91,95
di tubs (m)	0,032	0,032	0,015
L tubs (m)	4,45	3,2	3,45
Tipus de Pitch	Triangular	Triangular	Triangular
Pitch	0,044	0,044	0,023
Nt	111	161	495
Db (m)	0,65	0,69	0,562
Dis (m)	0,75	0,78	0,66
At (m ²)	0,49	0,35	0,2
vt (m/s)	1,43	1,4	1,54
Apas1tub (m ²)	8,00E-04	8,04E-04	1,77E-04
Ntp	18	38	248
npt	6	4	2
Baffle cut (%)	25	25	25
lb	0,29	0,32	0,263
n° pantalles	14	10	13
Ucorregida (W/m ² °C)	567,5	757,3	761,74
ht (W/m ² °C)	4885,13	4813,32	6041,74
vs (m/s)	0,3	0,4	0,3
hs (W/m ² °C)	1291,3	4131,56	7223,28
UR (W/m ² °C)	625,86	893,85	876,97
ΔP _t (KN/m ²)	34,93	20,07	22,88
ΔP _s (KN/m ²)	18,52	11,02	11,40

11.13. ASSECADORS FLUÏDITZATS

Per mostrar els càlculs s'agafa com a exemple l'assecador SE-601.

- Disseny funcional de l'assecador fluïditzat

La massa d'entrada a l'assecador provinent de la centrífuga CE-601 i de la centrífuga CE-602 és de 3609,05 kg de paracetamol sec amb un 25% d'humitat (36% d'àcid acètic i 64% d'aigua). L'objectiu d'aquest assecador és aconseguir que el producte tingui una humitat

del 1%, i per fer-ho s'introdueix nitrogen sec a 100°C de manera contínua. El motiu pel qual no s'utilitza aire sec és perquè oxidaria el paracetamol. Segons s'ha trobat a la bibliografia (McCabe) es considera que durant les 3 hores d'operació un 20% del sòlid (721,81 kg) és arrossegat pel nitrogen, aquest percentatge equival a les partícules més petites que es tornaran a introduir a l'assecador a través del cicló CI-601. Així tota la quantitat de paracetamol sec que entra a l'assecador surt de la mateixa manera.

En resum:

	Quantitat (kg)		
	Entrada	Recirculació	Sortida
Paracetamol	3609,05	721,81	3609,05
Àcid acètic	427,46	423,82	3,65
Aigua	775,55	742,74	32,81

Taula 11.26. Entrades i sortides de l'assecador.

Com es pot veure en la taula anterior, a la sortida ja s'ha inclòs la part de paracetamol que es torna a introduir.

Per conèixer la mida de les partícules de paracetamol existents dins l'assecador es fa una aproximació partint de varis exemples del llibre McCabe. Així, es considera el següent:

di (µm)	mi
50	0,05
100	0,15
150	0,23
200	0,38
250	0,1
400	0,08
500	0,01

On:

d_i =diàmetre de la partícula (µm)

m_i = distribució de la partícula

- Dades del nitrogen

Per trobar la temperatura i la humitat de sortida del gas d'assecat (N_2) s'utilitza el psicromètric coneixent la seva temperatura d'entrada ($T_{ent}=100^{\circ}C$) i humitat d'entrada ($H_{ent}=0,01$).

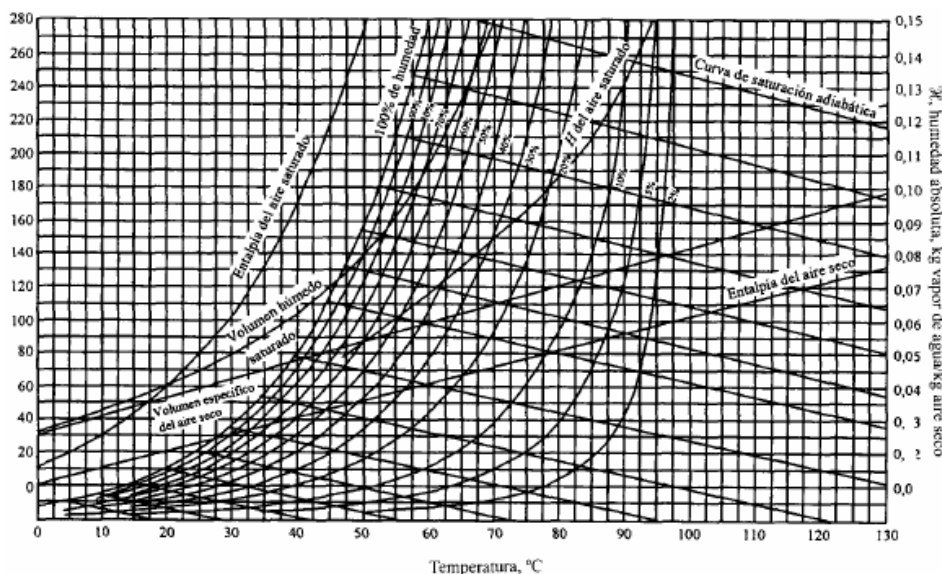


Figura 11.28. Psicromètric.

Llegint a la recta adiabàtica, les dades de sortida del gas són:

$T_{sort} = 37^{\circ}C$, corresponent a la temperatura humida.

$H_{sort} = 0,038$

A continuació es calcula la quantitat d'humitat present en el sòlid inicialment i després de 3 hores d'entrada contínua de nitrogen.

$$W_o = \frac{(427,46 + 775,55) \text{ kg Humitat}}{3609,05 \text{ kg APAP sec}} = 0,33 \frac{\text{kg Humitat}}{\text{kg APAP sec}}$$

$$W_f = \frac{(3,65 + 32,81) \text{ kg Humitat}}{3609,05 \text{ kg APAP sec}} = 0,01 \frac{\text{kg Humitat}}{\text{kg APAP sec}}$$

Amb el següent balanç es troba la massa de nitrogen necessària per l'assecat:

$$W_o - W_f = m \cdot (H_{sort} - H_{ent})$$

$$m = \frac{(0,33 - 0,01)}{(0,038 - 0,01)} = 11,54 \frac{kg \text{ } N_2 \text{ } sec}{kg \text{ } APAP \text{ } sec}$$

$$11,54 \frac{kg \text{ } N_2 \text{ } sec}{kg \text{ } APAP \text{ } sec} \cdot 3609,05 \text{ } kg \text{ } APAP \text{ } sec = 41663 \text{ } kg$$

Sabent que l'assecatge dura 3 hores, el cabal de nitrogen necessari serà de:

$$m_{N_2} = 13887,63 \text{ } kg/h$$

Sabent que el volum específic és la inversa de la densitat del nitrogen ($\rho_{N_2} = 0,915 \text{ } kg/m^3$) es calcula el seu cabal volumètric.

$$Q = 13887,63 \frac{kg \text{ } N_2 \text{ } sec}{h} \cdot \frac{m^3}{0,915 \text{ } kg \text{ } N_2 \text{ } sec} = 15179,40 \text{ } m^3/h$$

Per avaluar la velocitat a la que haurà de circular el nitrogen s'utilitza un valor típic de G trobat a la mateixa bibliografia de $3,8 \text{ } kg/s \cdot m^2$.

$$velocitat = \frac{G}{\rho_{N_2}} = 4,15 \text{ } m/s$$

Aleshores l'àrea de pas és de:

$$A_{pas} = \frac{Q/3600}{velocitat} = 1 \text{ } m^2$$

· Dimensions de l'assecador

El volum es troba mitjançant la massa de paracetamol d'entrada i la seva densitat.

$$V = 3609,05 \text{ kg} \frac{\text{m}^3}{1290 \text{ kg}} = 2,8 \text{ m}^3$$

Coneixent l'àrea de pas i el volum de l'assecador ja es pot calcular el diàmetre i l'alçada de l'assecador considerant cos cilíndric.

$$d = \sqrt{\frac{4 \cdot A_{pas}}{\pi}} = 1,14 \text{ m}$$

Dividint el volum entre l'àrea de pas es troba l'alçada ocupada pel paracetamol que és de 2,8 m. Per trobar l'alçada de l'assecador es sobredimensiona deixant 2 metres per tal que tingui espai per fluïditzar.

$$h = 2 + 2,8 = 4,8 \text{ m}$$

L'assecador a part d'un cos cilíndric consta de dos fons cònics per a l'entrada i sortida del gas. El càlcul del dimensionament d'aquest tipus de fons ja s'han explicat en equips anteriors. Per tant, els resultats són:

$$\alpha = 60^\circ$$

$$d_{\text{con petit}} = 0,2 \text{ m}$$

$$d_{\text{con gran}} = 1,14 \text{ m}$$

$$h_{\text{con}} = 0,54 \text{ m}$$

· Balanç d'energia

Es calcula el calor que aporta el nitrogen segons:

$$q = m_{N_2} c_{p_{N_2}} (T_{\text{sort}} - T_{\text{ent}}) = -909917,65 \text{ KJ/h}$$

$$\text{On: } c_{p_{N_2}} = 1,04 \text{ KJ/kg}^\circ\text{C}$$

El calor que absorbeix el paracetamol deixant evaporar aigua i àcid acètic serà igual al calor transmès pel nitrogen, d'aquesta manera es poden igualar les dues equacions i trobar la temperatura de sortida del paracetamol.

$$q = m_{APAP} C_{p_{APAP}} (T_{sort} - T_{ent}) + m_{humitat} \lambda v == 909917,65 \text{ KJ/h}$$

On:

$$C_{p_{APAP}} = 1,52 \frac{\text{KJ}}{\text{kg}^\circ\text{C}}, \quad \lambda v = 1646 \text{ KJ/kg}$$

Substituint els valors s'obté, $T_{sort}=53^\circ\text{C}$

· Disseny mecànic

Per tal de calcular els gruixos de l'equip es segueix la norma ASME ja explicada anteriorment. El material és AISI-304, es treballa a 1,5 atm de pressió i a una temperatura de disseny de 150°C .

Gruix cilindre= 4 mm

Gruix con superior= 4 mm

Gruix con inferior= 4 mm

Per calcular el pes de l'equip també es segueix el procediment explicat en altres apartats obtenint:

Pes equip buit = 680 Kg

Pes equip en operació= 3877,4 Kg

Tot seguit es mostra en una taula els resultats de l'assegador SE-401 juntament amb el SE-601.

Taula 11.27. *Paràmetres per al disseny d'un assecador SE-601 i SE-401.*

	SE-601	SE-401
$T_{ent} N_2$ (°C)	100	100
$H_{ent} N_2$ (°C)	0,01	0,01
$T_{sort} N_2$ (°C)	37	37
$H_{sort} N_2$ (°C)	0,038	0,038
Went (kg humitat/kg sòlid)	0,33	1,72
Wsort (kg humitat/kg sòlid)	0,01	0,02
massa N_2 (kg N_2 /kg sòlid)	11,54	60,78
cabal N_2 necessari (kg/h)	13887,63	16287,86
cabal volumetric N_2 (m ³ /h)	15179,40	17802,88
velocitat N_2 (m/s)	4,15	4,15
Àrea de pas (m ²)	1,02	1,19
Temps assecat (h)	3	3
Volum assecador	2,80	0,77
Diàmetre (m)	1,14	1,23
h_{cil} (m)	4,76	3,64
angle con	60°	60°
d con petit (m)	0,20	0,2
h_{con} (m)	0,54	0,60
Alçada total (m)	5,84	4,83
Calor N_2 (KJ/h)	909917,65	1067180,4
T_{ent} sòlid (°C)	20	1
T_{sort} sòlid (°C)	53	39
gruix _{cilindre} (mm)	4	4
gruix _{con} (mm)	4	4
Pes equip buit (kg)	679,64	613,92
Pes equip operació (kg)	3877,42	1489,13

11.14. REFREDADORS FLUÏDITZATS

- Disseny del refredador fluïditzat RE-601

· Dades dels corrents i balanç d'energia

La quantitat de paracetamol a l'entrada del refredador és de 3609,05 kg amb una humitat del 1% (36,46kg). Aquest es troba a la temperatura de 53°C i cal refredar-lo a 20°C per tal d'emmagatzemar-lo. Per fer-ho s'utilitza nitrogen a 20°C que s'escalfarà fins a 37°C arrossegant altre cop el 20% de les partícules més petites de sòlid, les quals s'introduiran al cicló CI-602 per separar-les del gas i recircular-les al refredador.

A continuació es determina el calor alliberat pel sòlid mitjançant el balanç d'energia considerant que el refredador dura 1 hora.

$$q = m_{APAP} C_{pAPAP} (T_{sort} - T_{ent}) + m_{humitat} C_{p_{humitat}} (T_{sort} - T_{ent})$$

On:

$$C_{pAPAP} = 1.52 \text{ KJ/kg} \cdot ^\circ\text{C}$$

$$C_{p_{humitat}} = 3,941 \text{ KJ/kg} \cdot ^\circ\text{C}$$

$$q = 3609,05 \cdot 1.52 \cdot (20 - 53) + 36,46 \cdot 3,941 \cdot (20 - 53) = -183410,77 \text{ KJ} / h$$

Com que el sistema és adiabàtic aquesta calor és la que rebrà el nitrogen, així, es pot calcular el cabal necessari de nitrogen per refredar el sòlid a 20 °C.

$$q = m_{N_2} C_{p_{N_2}} (T_{sort} - T_{ent})$$

$$m_{N_2} = \frac{q}{C_{p_{N_2}} (T_{sort} - T_{ent})} = \frac{183410,77}{1,04 \cdot (37 - 20)} = 10374 \text{ kg/h}$$

Aleshores,

$$Q_{N_2} = 10374 \text{ kg/h} \cdot \frac{m^3}{1,2 \text{ kg}} = 8645 \text{ m}^3/\text{h}$$

La velocitat a la que haurà de circular el nitrogen segons el valor trobat de G de 3,8 kg/s·m² és:

$$velocitat = \frac{G}{\rho_{N_2}} = 3,17 \text{ m/s}$$

I l'àrea de pas:

$$A_{pas} = \frac{Q_{N_2}/3600}{velocitat} = 0,76 \text{ m}^2$$

· Dimensions del refredador

El volum es calcula segons la quantitat de paracetamol que entra.

$$V = 3609,05 \text{ kg} \frac{m^3}{1290 \text{ kg}} = 2,8 \text{ m}^3$$

Igual que l'assegador fluïditzat es calcula el diàmetre i l'alçada del cos cilíndric.

$$d=0,98 \text{ m}$$

$$h=5,20 \text{ m}$$

Les dimensions de les parts superior i inferior còniques seran doncs:

$$\alpha=60^\circ$$

$$d_{con \text{ gran}} = 0,98 \text{ m}$$

$$d_{con \text{ petit}} = 0,2 \text{ m}$$

$$h_{con} = 0,45 \text{ m}$$

· Disseny mecànic

Pel càlcul dels gruixos es segueix altre cop el codi ASME i es té en compte que el material de l'equip és AISI 304, que es treballa a 1,5 atm de pressió i que la temperatura de disseny és de 100°C.

Gruix cilindre= Gruix con superior= Gruix con inferior= 3 mm

Per calcular el pes de l'equip es segueix el procediment explicat en equips anteriors.

Pes equip buit = 458,28 Kg ; Pes equip en operació= 3656,06 Kg

Tot seguit es mostra en una taula resum, els resultats del refredador RE-401 juntament amb el RE-601.

Taula 11.28. *Paràmetres pels dissenys dels refredadors RE-601 i RE-401.*

	RE-601	RE-401
Cabal N₂ (kg/h)	10373,91	3095,64
Calor (KJ/h)	183410,77	16097,31
T_{ent} sòlid (°C)	53	39
T_{sort} sòlid (°C)	20	20
T_{ent} N₂ (°C)	20	20
T_{sort} N₂ (°C)	37	37
cabal volumetric N₂ (m³/h)	8644,93	727,22
Volum refredador (m³)	2,80	0,77
Temps operació (h)	1	1
Diàmetre (m)	0,98	0,63
h_{cil} (m)	5,20	3,92
angle con	60°	60°
d con petit (m)	0,20	0,2
h_{con} (m)	0,45	0,25
Alçada total (m)	6	4,42
gruix_{cilindre} (mm)	3	3
gruix_{con} (mm)	3	3
Pes equip buit (kg)	458,28	216,39
Pes equip operació (kg)	3656,06	1091,60

11.15. CICLONS

· Dimensionament del ciclons

S'agafa d'exemple el cicló CI-601 on el seu corrent d'entrada prové de l'assecador SE-601.

S'elegeix un cicló tipus Lapple on les relacions geomètriques són les següents:

$$\frac{a}{D} = 0.5$$

$$\frac{H}{D} = 4$$

$$\frac{b}{D} = 0.25$$

$$\frac{B}{D} = 0.25$$

$$\frac{S}{D} = 0.625$$

$$v = 4$$

$$\frac{De}{D} = 0.5$$

$$k = 0.729$$

$$K = 40.3$$

$$\frac{h}{D} = 2$$

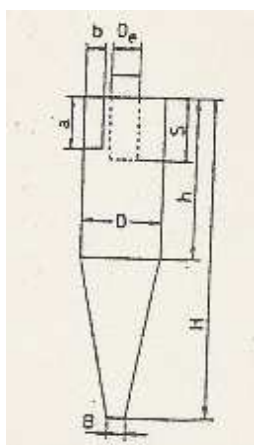


Figura 11.29. Esquema d'un cicló.

El procediment pel disseny del cicló consisteix en suposar un diàmetre i tot seguit desenvolupar un procés iteratiu per trobar tots els paràmetres de disseny fins aconseguir un rendiment més alt del 97% i unes pèrdues de càrrega menors a 2500 N/m².

Així doncs, els passos del procés iteratiu són:

1. Estimar les proporcions del cicló (a, b, S, De, h, H, B) a partir del diàmetre suposat i de les relacions geomètriques.
2. Càlcul de l'àrea transversal del flux d'entrada:

$$A = b \cdot a \text{ (m}^2\text{)}$$

3. Càlcul de la velocitat d'entrada del gas al cicló:

$$u = \frac{Q}{A} \text{ (m/s)}$$

4. Càlcul de l'exponent del vòrtex:

$$n = 1 - (1 - 0,67 \cdot D^{0,14}) \left(\frac{T}{283} \right)^{0,3}$$

On T és la temperatura del gas (°K)

5. Càlcul de l'eficàcia de cada fracció de partícules:

$$\eta_i = 1 - \exp \left[-2 \left(\frac{(1+n) \cdot Q \cdot k}{D^3} \cdot \frac{\rho_p d_i^2}{18\mu} \right)^{\frac{1}{2n+2}} \right]$$

On:

Q: Cabal volumètric (m³/s)

ρ_p : densitat de la partícula (1206 kg/m³)

μ : viscositat (9.9 · 10⁻⁴ kg/m·s)

d_i : diàmetre de la fracció de les partícules (m)

Considerant el pitjor dels casos, és a dir que en l'assecador SE-601 no hi hagués aglomeracions ni caiguda de partícules per gravetat, les partícules que es veuran arrossegades pel corrent de nitrogen en el cicló seran les més petites (les de 50 i 100 μm), les quals corresponen al 20% de les partícules de l'assecador.

Per tant, la distribució de mida de partícules que arriba al cicló de l'assecador és:

di (μm)	mi
50	0,25
100	0,75

6. Càlcul de la fracció total recuperada:

$$\eta = \sum \eta_i m_i$$

On :

m_i : tant per u en massa de cada fracció.

7. Càlcul de l'eficàcia corregida:

L'eficàcia corregida és funció de la fracció total recuperada calculada anteriorment i de la concentració de partícules en el gas segons el següent gràfic.

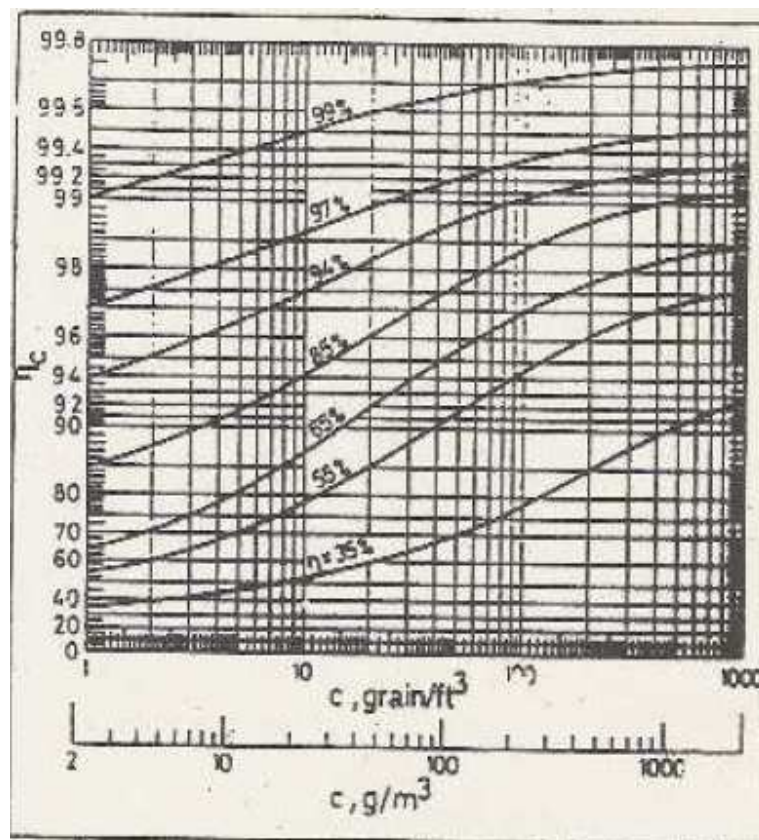


Figura 11.30. Correcció de l'eficiència en funció de la càrrega de partícules.

8. Càlcul de la pèrdua de càrrega:

$$\Delta P = \xi \frac{\rho u^2}{2} \quad (N/m^2)$$

On:

ρ : densitat del gas (1,1 kg/m³)

u : velocitat del gas (m/s)

$$\xi = 16 \frac{a \cdot b}{De^2}$$

9. Càlcul de la pèrdua de càrrega corregida:

$$\Delta P_c = \frac{\Delta P}{0,0086\sqrt{C} + 1} \quad \Delta P_c < \Delta P$$

Els resultats obtinguts després de les iteracions pels diferents ciclons són:

Taula 11.29. *Paràmetres obtinguts en el disseny dels ciclons.*

	CI-401	CI-402	CI-601	CI-602
D (m)	1,5	1	1,5	1
De (m)	0,75	0,5	0,75	0,5
a (m)	0,75	0,5	0,75	0,5
b (m)	0,38	0,25	0,375	0,25
S (m)	0,94	0,63	0,93	0,63
h (m)	3	2	3	2
H (m)	6	4	6	4
b (m)	0,38	0,25	0,38	0,25
v	4	4	4	4
k	0,73	0,73	0,73	0,73
K	40,3	40,3	40,3	40,3
A (m²)	0,28	0,13	0,28	0,13
Cabal N₂ (m³/h)	16287,86	727,22	15179,4	8644,93
u (m/s)	16,09	1,62	14,99	19,21
T_{sort} N₂	37	20	37	37
n	0,70	0,67	0,7	0,66
η₅₀	0,99	0,97	0,98	0,99
η₁₀₀	0,99	0,99	0,99	0,99
η	0,99	0,99	0,99	0,99
Q_{sòlid} recirculat (kg/h)	53,6	9686,75	240,60	721,81
C (g/m³)	3,29	13320,21	15,85	83,5
η_c	99,5	99,7	99,5	99,55
ΔP (N/m²)	1139	11,49	989,00	1623,87
ΔP_c (N/m²)	1121	5,77	956,20	1505,56
gruix_{cilindre} (mm)	4	4	4	4
gruix_{con} (mm)	4	4	4	4
Pes equip buit (kg)	1564	698	1564	698
Pes equip operació (kg)	2444	1578	4650	3898

11.16. EVAPORADORS

11.16.2. Disseny de l'evaporador E-501

L'evaporador discontinu E-501 té com a objectiu l'evaporació del 60% del dissolvent del corrent de sortida del reactor d'hidrogenació (R-501). Per realitzar aquesta operació l'evaporador disposa d'un sistema de calefacció consistent en un encamisat i un serpentí així com d'un agitador per tal d'homogeneïtzar la temperatura de la mescla.

a) Diàmetre, alçada i volum de l'equip

El volum de l'evaporador es calcula tenint en compte el volum inicial de la mescla, considerant que aquest volum constituirà aproximadament el 50% del volum total de l'equip.

Aproximadament el volum de càrrega de l'evaporador serà d'uns $28,3 \text{ m}^3$ per la qual cosa:

$$V_{\text{aprox. equip}} = 28,3 \cdot 2 = 56,6 \text{ m}^3$$

Per tal de trobar el diàmetre de l'equip es considera que l'evaporador tindrà forma cilíndrica, llavors;

$$\text{diàmetre} \rightarrow d = \sqrt[3]{V \cdot 4 / (\pi \cdot 1)} = 4,16 \text{ m} \approx 4 \text{ m}$$

A partir del diàmetre anterior es troba l'alçada seguint la relació $h/d = 1$ (s'agafa aquesta relació per tal de facilitar l'evacuació de vapor del sí del fluid).

$$Alçada \rightarrow h = 1 \cdot d = 1 \cdot 4 = 4 \text{ m}$$

Amb les dues dimensions conegudes es determina el volum del reactor segons:

$$V_{\text{equip}} = \frac{\pi}{4} \cdot d^2 \cdot h = 50,27 \text{ m}^3$$

b) Balanç d'energia. Calor a aportar.

Per tal de realitzar l'evaporació del dissolvent és necessari aplicar l'energia necessària en forma de temperatura a l'equip. Aquesta energia necessària es calcula a partir del volum de dissolvent i la calor de vaporització d'aquest segons:

$$q = m \cdot \lambda$$

La massa a evaporar correspon al 60% del volum inicial de dissolvent el qual està compost per 21303 Kg d'etanol i 2233,705 Kg d'aigua. Donat que la mescla etanol aigua forma un azeòtrop es considerarà que aquets s'evaporaran en la mateixa proporció.

També cal considerar el calor que cal aplicar a la mescla inicial per a que aquesta arribi a la temperatura d'ebullició. Per tant el calor que caldrà aplicar es calcularà com:

$$q_{\text{prescalfar}} = m \cdot C_p \cdot \Delta T$$

$$q_{\text{prescalfar}} = 26160,572 \text{ [Kg]} \cdot 3,615 \text{ [KJ/(Kg}\cdot\text{K)]} \cdot (351,5-348)\text{[K]} = 330997 \text{ KJ}$$

$$q_{\text{evaporar}} = m \cdot \lambda$$

$$q_{\text{evaporar}} = 14122,023 \text{ [Kg]} \cdot 976,2 \text{ [KJ/Kg]} = 13785919 \text{ KJ}$$

Considerant que l'equip comptarà amb 3h per a realitzar l'evaporació:

$$q_{\text{total}} = 4705638,53 \text{ KJ/h}$$

c) Necessitats de vapor

Com a fluid calefactant s'utilitza vapor a 2 Kg/m³ que condensarà en passar per els equips de bescanvi de calor de l'evaporador. Per tal de calcular les necessitats de vapor es fa servir la mateixa estratègia de càlcul feta servir per a determinar la calor a aportar.

$$m_{\text{vapor}} = \frac{q}{\lambda}$$

$$m_{\text{vapor}} = \frac{4705638,53 \text{ [KJ/h]}}{2256 \text{ [KJ/Kg]}} = 2085,83 \text{ Kg/h}$$

d) Àrea de bescanvi necessària

Per tal de calcular l'àrea de bescanvi necessària per a realitzar la transferència de calor es fa servir la següent equació:

$$A = \frac{q}{(U \cdot \Delta T)}$$

On per el coeficient global de calor U és fa servir el valor típic de 0,8 [(KJ/s)/(m²·K)] i ΔT es calcula com la diferència entre la temperatura de condensació del vapor de servei i la temperatura d'ebullició de la mescla.

$$A = \frac{4705638,53 \left[\frac{\text{KJ}}{\text{h}} \right] / 3600 [\text{s}]}{(0,8 \text{ [(KJ/s)/(m}^2 \cdot \text{K)]} \cdot 21,5 \text{ [K]})} = 75,995 \text{ m}^2$$

d) Disseny de la mitja canya

La mitja canya només arribarà fins a una alçada que garanteixi el contacte del líquid amb els elements de bescanvi de calor. Per aquest motiu la mitja canya només arribarà als 2 metres d'alçada del reactor. Per tant, l'àrea de bescanvi de la mitja canya, considerant una geometria cilíndrica, serà:

$$\text{Àrea paret del evaporador} \rightarrow A = \pi/4 \cdot D^2 \cdot H = \pi/4 \cdot 4^2 \cdot 2 = 25,133 \text{ m}^2$$

$$\text{Àrea cul del evaporador} \rightarrow A = \pi/4 \cdot D^2 = \pi/4 \cdot 4^2 = 12,566 \text{ m}^2$$

$$A_{\text{mitja canya}} = 37,699 \text{ m}^2$$

Per calcular el diàmetre de la mitja canya és suposa un diàmetre de canonada i es calcula la velocitat del vapor per aquesta canonada. D'aquesta manera es va iterant fins a trobar un valor de velocitat de vapor típic al voltant del 20 m/s.

Cal tenir en compte que l'evaporador també conté un serpentí per a realitzar el bescanvi de calor. Per tant, el cabal total de vapor necessari s'haurà de repartir entre aquestes dues instal·lacions. Per tal d'ajustar les velocitats de circulació del vapor per dins de les canonades s'ha decidit fer passar el 65% del vapor total necessari per la mitja canya.

Per tant;

Diàmetre mitja canya = 150 mm

$$\text{Àrea de pas del vapor} = \frac{\pi/4 \cdot D^2}{2} = \frac{\pi/4 \cdot (150 \cdot 10^{-3})^2}{2} = 8'836 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$$

$$\text{Velocitat de pas del vapor} = \frac{\text{cabal vapor} \cdot \text{percentatge que passa per la mitja canya}}{\text{àrea de pas}}$$

$$\text{Velocitat vapor} = \frac{0,290 \cdot 0,65}{8,836 \cdot 10^{-3}} = 21,312 \text{ m/s}$$

d) Disseny del serpentí

El serpentí es dissenya de manera que cobreixi les necessitats d'àrea que no pot assolir la mitja canya. Per tant, l'àrea del serpentí es calcularà com:

$$A_{\text{serpentí}} = A_{\text{total}} - A_{\text{mitja canya}} = 38,296 \text{ m}^2$$

El disseny de la canonada que compondrà el serpentí és farà de manera anàloga al mètode de càlcul fet servit per a la mitja canya. En el càlcul del serpentí es fixa una altura màxima d'aquest en l'evaporador de 1,35 m per tal de garantir que sempre estigui en contacte amb el líquid.

$$d_i = 80 \text{ mm}$$

$$x = \text{gruix del serpentí} = 2 \text{ mm}$$

$$d_e = d_i + 2 \cdot x = 84 \text{ mm}$$

$$L_{\text{serpentí}} = \text{longitud del serpentí} = A_{\text{Besc, serpentí}} / (\pi \cdot ((d_i + d_e)/2)) = 152,376 \text{ m}$$

$$R = \text{radi de la hèlix del serpentí} = (0.9 \cdot d)/2 = 1.8 \text{ m, on } d = \text{diàmetre del reactor} = 4 \text{ m}$$

$$n = \text{número de voltes del serpentí} = L_{\text{serpentí}} / (2 \cdot \pi \cdot R) = 13,473$$

$$e = \text{espaïat entre volta i volta del serpentí} = \frac{[h - n \cdot d_e] - [(2 \cdot 0.1 \cdot h)]}{n} = 0,618 \text{ cm}$$

$$\text{Àrea de pas del vapor} = \frac{\pi/4 \cdot (80 \cdot 10^{-3})^2}{2} = 5'027 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$$

$$\text{Velocitat vapor} = \frac{0,290 \cdot 0,35}{5,027 \cdot 10^{-3}} = 20,172 \text{ m/s}$$

e) Disseny mecànic

Per tal de calcular els gruixos i el pes es segueix la normativa ASME igual que en altres equips. Considerant que l'evaporador treballa a pressió atmosfèrica i que la temperatura de disseny és de 150°C s'obté:

Gruix cilindre: 12 mm

Gruix con: 12 mm

Gruix capçal toriesfèric: 6 mm

Pes cilindre: 4749,21 kg

Pes con: 1879,82 kg

Pes capçal toriesfèric: 366,90 kg

Pes equip buit: 7195,93 kg

Pes equip en operació: 49000,46 kg

f) Agitació

Segons la bibliografia s'ha trobat que per aquest tipus d'agitació el nombre de potència és de 2 amb una velocitat d'agitació de 10 rpm per tal de minimitzar incrustacions a la cara interna de les parets de l'evaporador. Així, s'obté una potència d'agitació de 6 KW.

11.16.2. Disseny del evaporador E-502

L'evaporador discontinu E-502 té com a objectiu l'evaporació de la totalitat del dissolvent procedent del evaporador E-501 . Per realitzar aquesta operació l'evaporador disposa d'un sistema de calefacció consistent en un encamisat i un serpentí així com d'un agitador per tal d'homogeneïtzar la temperatura de la mescla. El disseny d'aquest equip es realitza de manera idèntica al del evaporador E-501, per aquest motiu només es mostren els resultats de les dades de disseny.

a) Diàmetre, alçada i volum de l'equip

$$V_{\text{aprox. equip}} = 11,3 \cdot 2 = 22,6 \text{ m}^3$$

$$\text{diàmetre} \rightarrow d = \sqrt[3]{V \cdot 4 / (\pi \cdot 1)} = 3,07 \text{ m} \approx 3 \text{ m}$$

$$Alçària \rightarrow h = 1 \cdot d = 1 \cdot 3 = 3 \text{ m}$$

$$V_{\text{equip}} = \frac{\pi}{4} \cdot d^2 \cdot h = 21,21 \text{ m}^3$$

b) Balanç d'energia. Calor a aportar.

Considerant un temps d'evaporació de 3h.

$$q_{\text{evaporar}} = m \cdot \lambda = 3063537,54 \text{ KJ/h}$$

c) Necessitats de vapor

Com a fluid calefactant s'utilitza vapor a 2 Kg/m^3 que condensarà en passar per els equips de bescanvi de calor del evaporador. Per tal de calcular les necessitats de vapor es fa servir la mateixa estratègia de càlcul feta servir per a determinar la calor a aportar.

$$m_{\text{vapor}} = \frac{q}{\lambda} = \frac{3063537,54 \text{ [KJ/h]}}{2256 \text{ [KJ/Kg]}} = 2085,83 \text{ Kg/h}$$

d) Àrea de bescanvi necessària

$$A = \frac{q}{(U \cdot \Delta T)} = \frac{4705638,53 \left[\frac{\text{KJ}}{\text{h}} \right] / 3600 [\text{s}]}{(0,8 [(\text{KJ/s})/(\text{m}^2 \cdot \text{K})] \cdot 21,5 [\text{K}])} = 75,995 \text{ m}^2$$

d) Disseny de la mitja canya

La mitja canya només arribarà fins a una alçada que garanteixi el contacte del líquid amb els elements de bescanvi de calor. Per aquest motiu la mitja canya només arribarà als 1,7 metres d'alçada del reactor. Per tant, l'àrea de bescanvi de la mitja canya, considerant una geometria cilíndrica, serà:

$$\text{Àrea paret del evaporador} \rightarrow A = \pi/4 \cdot D^2 \cdot H = \pi/4 \cdot 3^2 \cdot 1,7 = 16,022 \text{ m}^2$$

$$\text{Àrea cul del evaporador} \rightarrow A = \pi/4 \cdot D^2 = \pi/4 \cdot 3^2 = 7,069 \text{ m}^2$$

$$A_{\text{mitja canya}} = 23,091 \text{ m}^2$$

Per tal d'ajustar les velocitats de circulació del vapor que per dins de les canonades s'ha decidit fer passar el 45% del vapor total necessari per la mitja canya.

Per tant:

Diàmetre mitja canya = 100 mm

$$\text{Àrea de pas del vapor} = \frac{\pi/4 \cdot D^2}{2} = \frac{\pi/4 \cdot (100 \cdot 10^{-3})^2}{2} = 3,927 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$$

$$\text{Velocitat de pas del vapor} = \frac{\text{cabal vapor} \cdot \text{percentatge que passa per la mitja canya}}{\text{àrea de pas}}$$

$$\text{Velocitat vapor} = \frac{0,189 \cdot 0,45}{3,927 \cdot 10^{-3}} = 21,612 \text{ m/s}$$

d) Disseny del serpentí

$$A_{\text{serpentí}} = A_{\text{total}} - A_{\text{mitja canya}} = 26,385 \text{ m}^2$$

$$\text{Alçada serpentí} = 1,7 \text{ m}$$

$$d_i = 80 \text{ mm}$$

$$x = \text{gruix del serpentí} = 2 \text{ mm}$$

$$d_e = d_i + 2 \cdot x = 84 \text{ mm}$$

$$L_{\text{serpentí}} = \text{longitud del serpentí} = A_{\text{Besc, serpentí}} / (\pi \cdot ((d_i + d_e)/2)) = 104,983 \text{ m}$$

$$R = \text{radi de la hèlix del serpentí} = (0,9 \cdot d)/2 = 1,35 \text{ m, on } d = \text{diàmetre del reactor} = 3 \text{ m}$$

$$n = \text{número de voltes del serpentí} = L_{\text{serpentí}} / (2 \cdot \pi \cdot R) = 12,377$$

$$e = \text{espaïat entre volta i volta del serpentí} = \frac{[h - n \cdot d_e] - [(2 \cdot 0,1 \cdot h)]}{n} = 2,588 \text{ cm}$$

$$\text{Àrea de pas del vapor} = \frac{\pi/4 \cdot (80 \cdot 10^{-3})^2}{2} = 5'027 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$$

$$\text{Velocitat vapor} = 20,637 \text{ m/s}$$

e) Disseny mecànic

Per tal de calcular els gruixos i el pes es segueix la normativa ASME igual que en altres equips. Considerant que l'evaporador treballa a pressió atmosfèrica i que la temperatura de disseny és de 150°C s'obté:

$$\text{Gruix cilindre: } 12 \text{ mm}$$

$$\text{Gruix con: } 12 \text{ mm}$$

$$\text{Gruix capçal toriesfèric: } 6 \text{ mm}$$

$$\text{Pes cilindre: } 2674,10 \text{ kg}$$

Pes con: 1063,90 kg

Pes capçal torresfèric: 206,59 kg

Pes equip buit: 4144,58 kg

Pes equip en operació: 21782,82 kg

f) Agitació

L'agitador és d'àncora igual que l'evaporador E-502 obtenint així una potència d'agitació de 1,5 KW.

11.17. COLUMNA D'ARROSSEGAMENT

Com s'ha comentat en l'apartat de descripció d'equips, la separació de l'ortonitrofenol i el dinitrofenol de la mescla paranitrofenol i aigua és una destil·lació azeotròpica binària. L'existència d'una fase aquosa i una fase orgànica és la que fa possible que el vapor arrossegui els components més volàtils. La pressió de vapor de cada fase és independent de l'altra, és a dir, que la composició del vapor serà constant i independent de la concentració al líquid.

Es dissenya una temperatura d'entrada a la torre de 70°C per tal de condensar el mínim possible de vapor de servei, que entra a 160°C per la mateixa raó. El fet de condensar poc vapor rau en l'eficàcia de la columna.

Es considera una sola etapa per a la destil·lació azeotròpica, per tant és com si es tractés d'un simple evaporador amb un vaporitzador que introdueix el vapor a una certa velocitat.

El corrent a tractar és el següent:

COMPONENTS	kg / batch	kg / h
Para	3455	863,75
Orto	808	202
Dinitro	57	14,25
H ₂ O	9409,08	2352,27
TOTAL	22129,08	5532,27

La torre opera en continu i per tant l'alimentació es fa també així. De totes maneres, al treballar en batch a tota la planta es donen els cabals màssics també en batch per tenir una idea del rendiment a cada batch.

Per tal de determinar el cabal de vapor necessari per arrossegar la fase orgànica es necessita la següent relació de pressions:

$$\frac{(Pvap)_{ONP}}{(Pvap)_w} = \frac{n_{ONP}}{n_{H_2O}}$$

On,

$(Pvap)_{ONP}$ = Pressió de vapor de la fase orgànica (o-nitrofenol)

$(Pvap)_w$ = Pressió de vapor de la fase aquosa (aigua)

n_{ONP} = mols de o-nitrofenol

n_{H_2O} = mols d'aigua

Considerant la mescla binària i amb la llei de Raoult s'obté:

$$P_w = x_w * (Pvap)_w$$

$$P_{ONP} = x_{ONP} * (Pvap)_{ONP}$$

On,

x_w = Fracció molar d'aigua en la fase aquosa

x_{ONP} = Fracció molar de ONP en la fase aquosa

P_{ONP} = Pressió parcial de l'orto-notrofenol

P_w = Pressió parcial de l'aigua

Sabent, que la suma de les pressions parcials és la pressió total:

$$P_w + P_{ONP} = P_T$$

Llavors;

$$x_w * (P_{vap})_w + x_{ONP} * (P_{vap})_{ONP} = P_T$$

Segons la llei de Henry:

$$y_i = \frac{P_i}{P_T}$$

On,

P_i = Pressió parcial de la fase orgànica o aquosa

P_T = Pressió total

y_i = Fracció molar de la fase gasosa de ONP o aigua.

La relació de mols d'aigua entre els mols de la fase orgànica és igual a la relació entre les fraccions molars de cada fase:

$$\frac{n_{ONP}}{n_w} = \frac{y_{ONP}}{y_w}$$

$$\frac{n_{ONP}}{n_w} = \frac{P_{ONP}}{P_w} = \frac{P_{ONP}}{P_T - P_{ONP}} = \frac{x_{ONP} * (P_{vap})_{ONP}}{P_T - x_w * (P_{vap})_w}$$

Com que la torre opera a pressió atmosfèrica (760 mmHg), es necessita la pressió de vapor de l'ortonitrofenol a la temperatura d'operació de la torre per conèixer la separació dels components orto i dinitro. Es suposa que tot el dinitrofenol és arrastrat pel vapor degut a la seva concentració en forma de traça.

Consultant la bibliografia s'ha trobat que la temperatura de formació de l'azeotrop a pressió atmosfèrica és de 93°C i que la pressió de vapor de l'ONP és de 11,23mmHg.

Per tal d'assegurar un bon rendiment de separació es sobredimensiona un 20% el cabal de vapor:

Es tenen 202 kg/h de ONP que equivalen a 1452 mols/h.

La pressió total és de 760mmHg i per tant: $P_{ONP}=11,23\text{mmHg}$

$$P_{H_2O}=748,77\text{mmHg}$$

Quedant:

$$\left(1452,08 \frac{\text{mols ONP}}{\text{h}} \cdot \frac{748,77 \text{ mols } H_2O}{11,23 \text{ mols ONP}} \cdot \frac{18 \cdot 10^{-3} \text{ kg } H_2O}{1 \text{ mol } H_2O} \right) \cdot 1,2 = 2100 \text{ kg/h } H_2O$$

El vapor ha d'aportar l'energia suficient per a que tota la mescla assoleixi els 93°C i per a que s'evapori el ONP juntament amb l'àcid nítric i el dinitrofenol. Per tant, es realitza el següent balanç d'energia:

$$q = C_p * m_{mescla} * \Delta T + \lambda_{org} * m_{Org} + \lambda_{acid} * m_{acid}$$

Les dades del calor latent i de calor específic són:

Paràmetres	Valors
λ_{org} (KJ/mol)	50
λ_{acid} (KJ/mol)	2200

λ_{aigua} (KJ/mol)	2260
Cp vapor (KJ/Kg*°K)	2,1

Aquesta calor que ha d'aportar el cabal de vapor és equivalent a:

$$q = C_p * m_{vap} * \Delta T + m_{vap} * \lambda_{vap}$$

Que permetrà calcular la quantitat de vapor que condensa dins de la torre al passar per la mescla aquosa. S'ha calculat que la quantitat de vapor que condensa és el 2% del vapor que entra pel vaporitzador a la torre, quedant així la següent taula:

LÍQUID	Q₁	90187,27 W	
		°K	°C
	T_{sortida}	366	93
	T_{entrada}	343	70
VAPOR	Q₂	90187,27 W	
		°K	°C
	m_{vap}	0,58	kg/s
	ΔT	52,1	°C
		°K	°C
	T_{sortida}	380,9	107,9
	T_{entrada}	433	160

A falta de dades bibliogràfiques s'ha suposat un diàmetre de 2,5 metres per tal de no tenir unes pèrdues de càrrega del vapor massa elevades. Coneixent els cabals màssics a l'entrada i fixant un temps de residència hidràulic suposat per l'entrada líquida es pot calcular un volum de columna:

$$Q_{entrada} = 5,16 \text{ m}^3/h$$

$$TRH_{suposat} = 4 \text{ h}$$

$$V = Q \cdot TRH = 5,16 \frac{\text{m}^3}{h} \cdot 4h = 20,64 \text{ m}^3$$

Per tant, amb el volum de dissolució i el diàmetre suposat de 3m es pot calcular l'alçada del líquid contingut en la columna:

$$V = A \cdot h = \frac{\pi}{4} D^2 \cdot h = \frac{\pi}{4} \cdot 2,5^2 \cdot h = 20,64 \text{ m}^3$$

$$h = 4,2 \text{ m}$$

Es calcula la pressió que aporta la columna de líquid:

$$P_{columna} = \rho \cdot h \cdot g$$

On:

h : alçada de la columna de líquid (4,2m)

g : gravetat (9,8m/s)

ρ : densitat mitjana de la mescla (1072 kg/m³)

$$\Delta P = 9,81 \frac{\text{m}}{\text{s}^2} \cdot \frac{1072 \text{ kg}}{\text{m}^3} \cdot 4,2 \text{ m} \cdot 44218 \text{ Pa} = 0,44 \text{ atm}$$

Una pèrdua de càrrega acceptable pel disseny de la torre.

Com que el vapor de servei s'utilitza a 160°C i 6 atmosferes:

$$P_{sortida} = 6 \text{ atm} - 0,44 \text{ atm} = 5,55 \text{ atm}$$

El disseny de la torre queda per tant de la següent forma, amb un sobredimensionament del 20% del volum de dissolució com a headspace:

Disseny de la torre	
Volum	24,46 m ³
Diàmetre	2,57 m
Alçada	4,84m
Pes buida	1543,15kg
Pes aigua	26011,15kg
Pes operació	27772,82kg
Tipus de fons	Toriesfèric
Gruix acer	5mm

Disseny del difusor de la columna

Per al càlcul dels paràmetres de disseny del difusor es considera segons la bibliografia consultada (Coulson Vol.6) els següents valors típics:

Paràmetres	Valors
Diàmetre forats (mm)	10
Pitch (mm)	50
Velocitat del vapor (m/s)	20

$$Pitch = 5 * D_h = 5 * 10mm = 50mm$$

Es calcula la secció que ha de tenir cadascun dels forats del difusor:

$$Sh = \pi * r_h^2 = \pi * 5^2 = 78,54 \text{ mm}^2$$

Cabal de vapor que passa per un forat:

$$Qg = v_{vap} * Sh = 20 * 78,54 = 1,57 \text{ mm}^3/s$$

Pel càlcul del nombre de forats es fa a partir del cabal volumètric de vapor d'aigua i la densitat del vapor a la temperatura d'entrada de vapor.

$$Cabal \text{ vapor} = \frac{2100 \text{ kg}}{h} \cdot \frac{1m^3}{3,2 \text{ kg}} \cdot \frac{1h}{3600 \text{ s}} = 0,18 \text{ m}^3/s$$

$$n^{\circ} \text{ forats} = \frac{0,18m^3}{0,00157 \text{ m}^3/s} = 115 \text{ forats}$$

Càlcul de l'àrea no ocupada per forats (An):

$$An = Ap - Scv$$

On,

Ap: Àrea de secció de columna (m^2)

Scv: Secció total de pas de vapor a través dels orificis (m^2)

$$Ap = \pi * \frac{D_h^2}{4} = \pi * \frac{10^2}{4} = 1,13m^2$$

$$Scv = 0,00911m^2$$

$$\text{Per tant, } An = 1,125 \text{ m}^2$$

Càlcul de l'àrea perforada (Ah):

$$\frac{Ah}{Ap} = 0,9 * \left(\frac{D_h}{pitch} \right)^2 = 0,036$$

$$Ah = 0,036 * Ap = 0,041 m^2$$

Càlcul de les pèrdues de pressió:

$$h_t = h_d = 51 * \left(\frac{v_g}{C_o} \right)^2 * \frac{\rho_v}{\rho_L} = 51 * \left(\frac{\frac{20m}{s}}{0,7} \right)^2 * \frac{\frac{3,2kg}{m^3}}{1072,01 \frac{kg}{m^3}} = 124,3$$

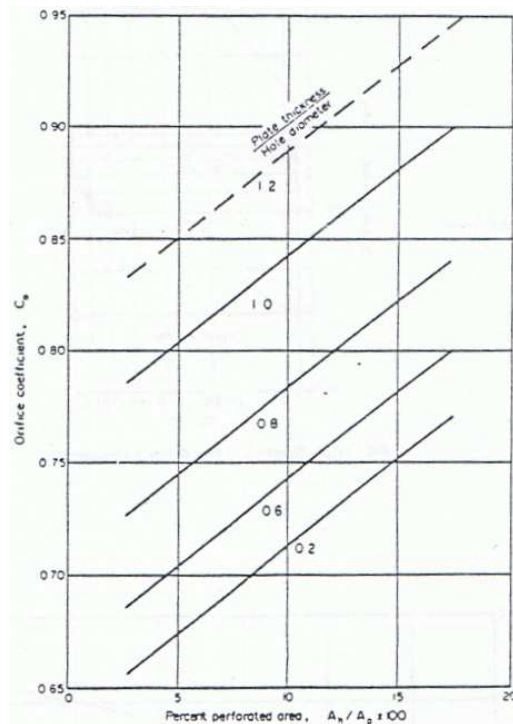
$$\Delta P = h_t * 9,81 * 10^{-3} * \rho_L = \frac{1072,01 Kg}{m^3} * 9,81 \frac{m}{s^2} * 10^{-3} = 1306,7 Pa$$

On:

ρ_v : densitat del vapor ; ρ_L : densitat de la mescla

v_g : velocitat del gas

C_o : Coeficient de descàrrega de l'orifici, es troba gràficament, té un valor de 0,7.



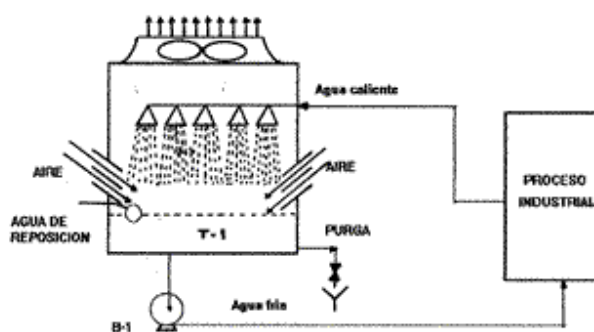
11.18. SERVEIS.

A continuació es presenten els diferents serveis necessaris per operar en planta.

11.18.1 CHILLER

Al procés es presenten diferents equips en que serà necessari realitzar un refredament, (bescanviadors, cristal·litzadors, tancs refredadors.)

Moltes vegades no serà suficient passar aigua provinent d'una torre de refrigeració, donat que la temperatura de sortida que es requereix en l'equip es inferior a la temperatura ambient de l'aigua. . En aquests casos s'ha decidit treballar amb fluid procedent de chiller (unitat refredadora), que permetrà un major bescanvi. La seva operació es:



El chiller treballarà amb aigua glicolada, en un 30%. Els equips que requeriràn d'aquest servei són:

Àrea	Equip	Cabal (kg/s)
300	B-303	17,37
	R-301	18,75
400	Z-402	5,25
	Z-404	5,25
600	Z-602	6
	Z-603	0,57
	TOTAL	53,2

Per realitzar el càlcul del cabal necessari d'aigua glicolada s'ha tingut en compte que els equips que treballen en continu consumiran fluid durant les 24 hores, mentre que pels equips en discontinu s'ha realitzat una mitja, tenint en compte el cabal necessari per un dia d'operació.

Per exemple, en el cas d'un dels cristal·litzadors (Z-402), la seva necessitat de refrigeració serà:

$$7 \frac{kg}{s} \cdot \frac{60 s}{1 min} \cdot \frac{60 min}{1 hora} \cdot \frac{3 hores}{1 batch} \cdot \frac{6 batch}{1 dia} = 453600 \text{ kg de chiller/dia}$$

$$453600 \frac{kg \text{ chiller}}{dia} \cdot \frac{1 dia}{24 hores} \cdot \frac{1 hora}{3600 seg} = 5,25 \frac{kg}{s} \text{ (si fos continu)}$$

Per tal de poder escollir el chiller necessari es passa a calcular la potència frigorífica necessària de l'equip:

$$P_{frigorifica} = m_{fluid} \cdot Cp \cdot (T_{sortida} - T_{entrada})$$

On: m_{fluid} : cabal de fluid a refredar (kg/s)

Cp : Capacitat calorífica del fluid, en aquest cas d'aigua glicolada (kJ/kgK)

$T_{sortida}$: temperatura de sortida del fluid del chiller (°C)

$T_{entrada}$: temperatura d'entrada del fluid al chiller (°C)

$$P_{frigorifica} = 53,2 \frac{kg}{s} \cdot 3,69 \frac{KJ}{kg \cdot K} \cdot (-5^{\circ}C - (-10^{\circ}C)) = 981,54 \frac{KJ}{s} = 981,54 \text{ kW}$$

Aquest valor de potència, però, no contempla el cas més desfavorable, en que tots els equips que necessiten de chiller (també els discontinus) es trobin treballant alhora. La taula modificada en aquest cas seria:

Àrea	Equip	Cabal (kg/s)
300	B-303	17,37
	R-301	18,75
400	Z-402	7
	Z-404	7
600	Z-602	8
	Z-603	0,76
	TOTAL	58,88

La potència modificada segons el cabal màxim de treball es:

$$P_{frigorifica} = 58,88 \frac{kg}{s} \cdot 3,69 \frac{KJ}{kg \cdot K} \cdot (-5^{\circ}C - (-10^{\circ}C)) = 1086,33 \frac{KJ}{s}$$

$$= 981,54 kW$$

Aquest serà el valor de potència que haurà d'assumir l'equip.

Per subministrar la potència requerida s'ha decidit la instal·lació d'un únic equip de fred. L'equip escollit es el model PHOENIX, que presenta una capacitat calorífica de 1536 kW, subministrat per l'empresa Novair-MTA.

11.18.2. AIGUA DE REFRIGERACIÓ.

Serà el servei majoritari a planta, ja que les reaccions que es produeixen son molt exotermiques, i caldrà eliminar aquest calor mitjançant aigua de refrigeració.

El càlcul de l'aigua de torre necessaria en planta s'ha calculat de la mateixa forma que el fluid de chiller. Els resultats són:

Àrea	Equip	Cabal (kg/s)
300	B-301	11,46
400	Z-401	3
	Z-403	1,5
	B-401	21,29
500	R-501	3,76
	B-501	68,27
600	Z-602	1,5
	B-601	63,23
	TOTAL	174,01

Un cop es sap el cabal total d'aigua de refrigeració necessària es passa a calcular quina serà la calor a dissipar per les torres de refrigeració:

$$Q = m_{fluid} \cdot Cp \cdot (T_{sortida} - T_{entrada})$$

On: m_{fluid} : cabal de fluid a refredar (kg/s)

Cp : Capacitat calorífica del fluid, en aquest aigua (kJ/kgK)

$T_{sortida}$: temperatura de sortida de l'aigua de la torre (°C)

$T_{entrada}$: temperatura d'entrada de l'aigua a la torre (°C)

$$Q = 174,01 \cdot 4,18 \cdot (40 - 25) = 10910,42 \text{ kW}$$

D'igual forma que amb el chiller, es calcula la potència màxima requerida per la planta:

Àrea	Equip	Cabal (kg/s)
300	B-301	11,46
400	Z-401	4
	Z-403	2
	B-401	21,29
500	R-501	12,9
	B-501	68,27
600	Z-602	2
	B-601	63,23
	TOTAL	185,15

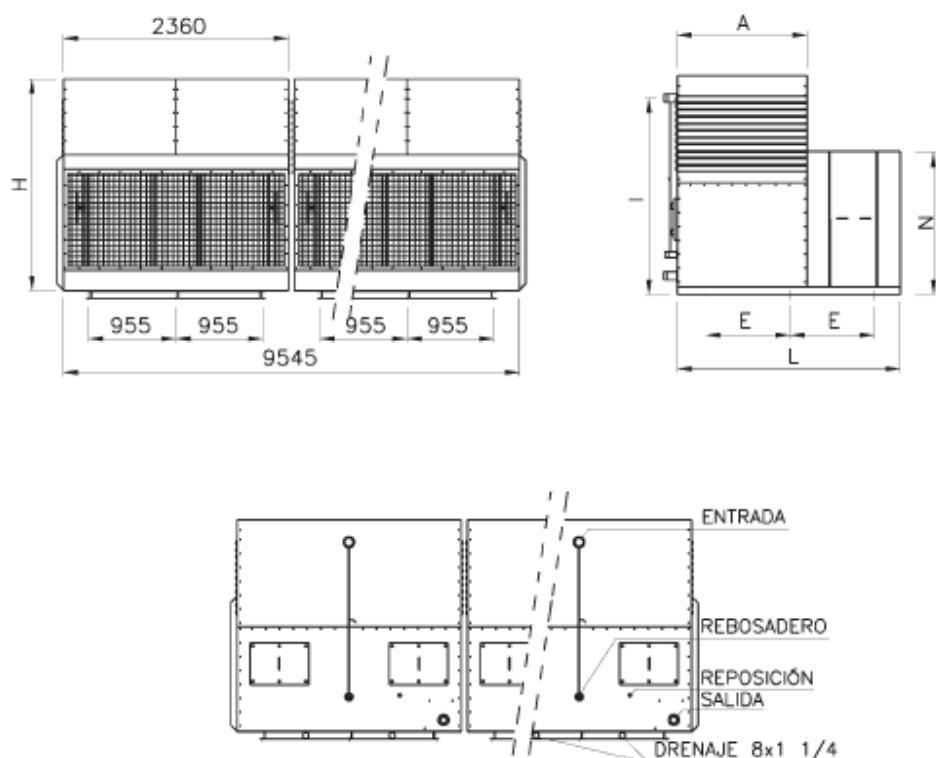
$$Q = 185,15 \cdot 4,18 \cdot (40 - 25) = 11608,905 \text{ kW}$$

Es necessitaran, doncs, dissipar 11608,905 kW.

Hi ha diferents proveedors de torres de refrigeració (GELFRED COMPRESSORS,S.A, CLYMA, S.A, VIBADIS, S.A, etc). En aquest cas s'ha escollit l'empresa INDUMEC, S.L, que presenta una serie de models de torres, segons les especificacions i capacitat.

Per al nostre procés s'ha escollit el model TC-842 , que presenta capacitat suficient per bescanviar 5875 kW,

Les dimensions de la torre són:



Torre	A(mm)	E(mm)	I(mm)	N(mm)	L(mm)	H(mm)
TC-635	2410	1100	2035	1910	3910	2280

			Connexions				Punts de recolçament
Motor ventilador (kW)	Pes buida (kg)	Pes amb càrrega (kg)	Entrada	Sortida	Rebosadero	Reposició	
8*7,5	6440	14480	4*6"	4*6"	4*3"	4*1 1/2"	48

Amb la capacitat de la torre TC-842 , sabent els kW necessaris a bescanviar en el procés es pot saber de quantes torres de refrigeració serà necessari disposar:

$$n^{\circ} \text{ torres} = \frac{\text{Calor a bescanviar (kW)}}{\text{Calor d'unatorre (kW)}} = \frac{11608,905 \text{ kW}}{5875 \text{ kW}} = 1,97 = 2 \text{ torres}$$

Un cop es sap el calor a dissipar a la torre es pot calcular el cabal massic d'aigua fresca necessaria:

$$Q_{\text{make-up}} = \frac{Q_{\text{dissipar}}}{538 \text{ kcal/kg}} = \frac{11608,905 \frac{\text{kJ}}{\text{s}} \cdot 3600 \frac{\text{s}}{\text{h}} \cdot \frac{1 \text{ kcal}}{4,18 \text{ kJ}}}{583 \frac{\text{kcal}}{\text{kg}}} = 17149,4 \text{ kg/h}$$

11.19.3. Estació transformadora

L'estació transformadora s'ha calculat amb l'equació següent:

$$KVA = \frac{\text{Potencia planta}}{\cos\theta} = \frac{4531}{0,8} = 5664,6$$

Serà necessaria, per tant, una estació transformadora de 5665 kVA.

11.19. SCRIPTS DE MATLAB

11.19.1.Reactor de nitració

```
function reaccio1_cristalitzacio1
clear
clc
close all

%% _____DEFINICIÓ DE PARÀMETRES_____ %%
%----->CONSTANTS DEL PROCÉS

k1=1e-2;%0.78150e-2;          % s^-1
k2=1e-5;%2e-3;              % s^-1
k3=1e3;                      % s^-1

%----->COEFICIENTS ESTEQUIOMÈTRICS I RENDIMENTS

vfenol=-1;
vnitric=-4;
vpara=0.8;
vorto=0.187;
vdinitro=0.01;
vaigua=4;
vnitros=-1;
vnitrosos=1;

%----->PESOS MOLECULARS (g/mol)

PM_sulfuric=98.07;
PM_nitros=47.013;
PM_nitric=63.013;
PM_fenol=94.113;
PM_orto=139.11;
PM_para=139.11;
PM_dinitro=184.11;
```

```

PM_aigua=18.015;
PM_nitrosos=2*14+4*16;
%----->DENSITATS (Kg/litre)
d_nitric=1.522;
d_sulfuric=1.844;
d_nitros=1.522;
d_fenol=1.071;
d_aigua=1;

%-----> CONCENTRACIONS I VOLUMS INICIALS
Cnitric0=2.11; % Concentració inicial de reactius----
>mols/litres
Cfenol0=0;
Cpara0=0;
Corto0=0;
Cdinitro0=0;
Csulfuric0=1.98;
Cnitros0=0.45;
Cnitrosos0=0;

V_inicial=25000; % Volum inicial alimentat al reactor (litres)
Cfenol_aliment=8.1; % Concentració de fenol a l'aliment---->mols/litres
v0=6.4; % Addició de fenol + aigua (lineal)----> litres/s
Ffenol=Cfenol_aliment.*v0; % Flux de fenol addició (mols/s)
f_fenol=Ffenol.*PM_fenol/1000; % Flux fenol addició (kg/s)
FENOL=f_fenol*600 % Fenol alimentat per batch (kg)

Naigua0=(Csulfuric0*V_inicial*PM_sulfuric*2/98/PM_aigua+Cnitric0*V_inicia
l*42*PM_nitric/68/PM_aigua); % Mols aigua inicial de dissolució al
reactor
Maigua0=Naigua0*PM_aigua/1000
Caigua0=Naigua0/V_inicial% Conc. aigua inicial al reactor (mols/litres)

```

```

%-----> DADES BALANÇ ENERGIA

U=500;                                % Coeficient de bescanvi de calor (J/m^2/s/K)

Trefrigerant=273-10;                  % Temperatura d'entrada del fluid refrigerant
(K)

cpfenol=127.21;                       % Capacitats calorífiques (J/(mol·K))
cpnitric=123.1;
cpaigua=75.4;
cpnitrosos=15;
cp_productes=144;
cpnitros=123.1;
cpsulfuric=139;

cp_refrigerant=(4110+4180)/2;%3600;    % J/Kg·K

T0=273+20;                            % Temperatura a la que entren els reactius (K)

dH1=-46.24e3;                          % Entalpia reacció (J/mol)
dH2=-dH1;
dH3=-133.48e3;%-526.74e3;
dH_total=-133.48e3;

mc1=10;%9.43;                          % Cabal de fluid refrigerant durant la reacció (kg/s)
mc2=10;
mc3=10;

%%_____FUNCIÓ DE BALANÇOS_____%%

opcions2=odeset('AbsTol',1e-06,'RelTol',1e-06,'MaxStep',1);

[t,y]=ode15s(@balancos,[0 3600],[Cnitric0 Cfenol0 Cpara0 Corto0 Cdinitro0
Caigua0 Csulfuric0 Cnitros0 Cnitrosos0 T0],opcions2);

V=V_inicial+v0.*t;

V_final=V(end)/1000;

%-----> DADES DEL BESCANVI DE CALOR I EL SERPENTÍ

A=40;                                % Àrea de bescanvi del serpentí (m2)

```

```

UA=U*A;

Q_refrigerant1=mc1/1000;    % Cabal refrigerant durant la reacció (m3/s)

Dnominal=(2.54e-2)*4;        % Diàmetre nominal (m)

Apas=(pi*((Dnominal)^2)/8);    % Àrea de pas del serpentí (m2)

v_refrigerant1=Q_refrigerant1/Apas    % Velocitat del refrigerant durant
la reacció (m/s)

L_serpenti=2*A/(pi*Dnominal)    % Longitud serpentí (m)

Volum_reactor=V_final*1.1;    % Volum del reactor amb un headspace
del 10%

%-----> FUNCIO QUE CALCULA ELS PARÀMETRES DEL REACTOR

function dm=diam(d)

h_reactor=2*d;                % Alçada del reactor (m)

dm=pi*d^2/4*h_reactor-Volum_reactor;

R=0.9*d/2;                    % Diàmetre de la hèlix del serpentí (m)

n=L_serpenti/(2*pi*R);        % Número de voltes del serpentí

end

diametre_reactor=fzero(@diam,1)    % Diàmetre del reactor (m)

h_reactor                    % Alçada del reactor (m)

R                    % Radi de l'hèlix del serpentí

numero_voltes_serpenti=n        % Voltes del serpentí

espaiat_serpenti=(h_reactor-n*Dnominal-2*0.05*h_reactor)/n

%-----> FUNCIO DELS BALANÇOS (EQUACIONS DIFERENCIALS)

function yprima=balancos(t,y)

V=V_inicial+v0.*t;

yprima=zeros(10,1);

Trefrigerant=273-10;

%----> Concentracions (mol/litre) i Nombre de mols (mols) de tots els
components

%(Definició de cada component)%

```



```

Cnitric=y(1);Nnitric=Cnitric.*V;
Cfenol=y(2);Nfenol=Cfenol.*V;
Cpara=y(3);Npara=Cpara.*V;
Corto=y(4);Norto=Corto.*V;
Cdinitro=y(5);Ndinitro=Cdinitro.*V;
Caigua=y(6);Naigua=Caigua.*V;
Csulfuric=y(7);Nsulfuric=Csulfuric.*V;
Cnitros=y(8);Nnitros=Cnitros.*V;
Cnitrosos=y(9);Nnitrosos=Cnitrosos.*V;
T=y(10);

%-----> Definició de paràmetres necessaris pel balanç d'energia

Qr=mc1.*cp_refrigerant.*(Trefrigerant-T).*(1-exp(-
U.*A./mc1./cp_refrigerant));

T_sortida_refrigerant=T-(T-Trefrigerant).*(exp(-
U.*A./mc1./cp_refrigerant));

Ncp1=cpnitric.*Nnitric+cpnitros.*Nnitros+cpnitrosos.*Nnitrosos+cpaigua.*N
aigua;

Ncp2=Ncp1;

Ncp3=cpfenol.*Nfenol+cpnitrosos.*Nnitrosos+cpnitros.*Nnitros+cp_productes
.*(Npara+Norto+Ndinitro);

Ncp4=cpsulfuric.*Nsulfuric;

Ncp_total=cpfenol.*Nfenol+cp_productes.*(Npara+Norto+Ndinitro)+cpaigua.*Naig
ua+cpnitric.*Nnitric+cpnitros.*Nnitros+cpnitrosos.*Nnitrosos+cpsulfuric.*Nsul
furic;

%----->Balanços al reactor

yprima(1)=-k1.*Cnitros+k2.*Cnitrosos-v0.*Cnitric./V;           % Àcid Nítric
yprima(2)=-k3.*Cfenol+v0.*(Cfenol_aliment-Cfenol)./V;         % Fenol
yprima(3)=- (vpara/vfenol) .*k3.*Cfenol-v0.*Cpara./V;         % PNP
yprima(4)=- (vorto/vfenol) .*k3.*Cfenol-v0.*Corto./V;         % ONP
yprima(5)=- (vdinitro/vfenol) .*k3.*Cfenol-v0.*Cdinitro./V;   % DNP

```

```

yprima(6)=k1.*Cnitros-k2.*Cnitrosos+v0.*(10.571-Caigua)./V; % Aigua
yprima(7)=-v0.*Csulfuric./V; % Àcid sulfúric
yprima(8)=-k1.*Cnitros+k2.*Cnitrosos+k3.*Cfenol-v0.*Cnitros./V; % HNO2
yprima(9)=k1.*Cnitros-k2.*Cnitrosos-k3.*Cfenol-v0.*Cnitrosos./V; % N2O4
yprima(10)=(Qr-Ffenol.*cpfenol.*(T-
T0)+yprima(2).*V.*dH3+yprima(8).*V.*dH1+yprima(9).*V.*dH2)./Ncp_total;

end

```

```

%% _____ GRÀFICS _____ %%

```

```

%-----> Volum vs temps

```

```

figure(1)
plot(t,V)
grid on
title('Evolució del volum')
xlabel('temps (s)')
ylabel('volum (litres)')

%-----> Conentracions vs temps

figure(2)
plot(t,y(:,3),t,y(:,4),t,y(:,5),t,y(:,2),t,y(:,8),t,y(:,9))
title('Evolució de les concentracions')
grid on
xlabel('Temps (s)')
ylabel('Concentracions (mol/litres)')
legend('Cpara','Corto','Cdinitro','Cfenol','C_H_N_O_2','C_N_2_O_4')

```

```

figure(3)
plot(t,y(:,1),t,y(:,7))
title('Evolució de les concentracions')
grid on
xlabel('Temps (s)')

```

```
ylabel('Concentracions (mol/litres)')
legend('Cnitric','Csulfuric')

figure(4)
plot(t,y(:,3),t,y(:,4),t,y(:,5),t,y(:,2))
title('Evolució de les concentracions')
grid on
xlabel('Temps (s)')
ylabel('Concentracions (mol/litres)')
legend('Cpara','Corto','Cdinitro','Cfenol')

%-----> Mols vs temps
figure(5)
plot(t,y(:,3).*V,t,y(:,4).*V,t,y(:,5).*V,t,y(:,2).*V,t,y(:,8).*V,t,y(:,9)
.*V)
title('Evolució del nombre de mols')
grid on
xlabel('Temps (s)')
ylabel('Producció (mols)')
legend('Npara','Norto','Ndinitro','Nfenol','Nacid_nitros','Ngasos')

%----->Temperatura vs temps (Balanç d'energia)

T_sortida_refrigerant=y(:,10)-(y(:,10)-Trefrigerant).*(exp(-
U.*A./mcl./cp_refrigerant));
hugui=mean(T_sortida_refrigerant)
figure(6)
plot(t,y(:,10),t,T_sortida_refrigerant)
title('Evolució de la temperatura')
legend('Temperatura','Temperatura sortida refrigerant')
grid on
```

```

xlabel('Temps (s)')
ylabel('Temperatura (K)')

%% -----
%%
%% -----SORTIDA D'ÒXIDS-----
%%
%% -----
%%

opcions2=odeset('AbsTol',1e-06,'RelTol',1e-06,'MaxStep',0.5);

[t3,y3]=ode15s(@balancos3,[3600 5400],[y(end,1) y(end,2) y(end,3)
y(end,4) y(end,5) y(end,6) y(end,7) y(end,8) y(end,9)
y(end,10)],opcions2);

V3=V(end);

%-----> FUNCIO DELS BALANÇOS (EQUACIONS DIFERENCIALS)

function yprima3=balancos3(t3,y3)

V3=V_final;

yprima3=zeros(10,1);

%A=40;

Ffenol3=0;

%----> Concentracions (mol/litre) i Nombre de mols (mols)de tots els
components

%(Definició de cada component)%

Cnitric3=y3(1);Nnitric3=Cnitric3.*V3;

Cfenol3=y3(2);Nfenol3=Cfenol3.*V3;

Cpara3=y3(3);Npara3=Cpara3.*V3;

Corto3=y3(4);Norto3=Corto3.*V3;

Cdinitro3=y3(5);Ndinitro3=Cdinitro3.*V3;

Caigua3=y3(6);Naigua3=Caigua3.*V3;

Csulfuric3=y3(7);Nsulfuric3=Csulfuric3.*V3;

Cnitros3=y3(8);Nnitros3=Cnitros3.*V3;

```

```

Cnitrosos3=y3(9);Nnitrosos3=Cnitrosos3.*V3;
T3=y(end,10);

%----->Balanços al reactor

yprima3(1)=-k1.*Cnitros3+k2.*Cnitrosos3;
yprima3(2)=0;
yprima3(3)=0;
yprima3(4)=0;
yprima3(5)=0;
yprima3(6)=k1.*Cnitros3-k2.*Cnitrosos3;
yprima3(7)=0;
yprima3(8)=-k1.*Cnitros3+k2.*Cnitrosos3;
yprima3(9)=k1.*Cnitros3-k2.*Cnitrosos3;
end

% %% _____ GRÀFICS _____ %%

%-----> Mols vs temps

figure(7)
plot(t3,y3(:,3).*V3,t3,y3(:,4).*V3,t3,y3(:,5).*V3,t3,y3(:,2).*V3,t3,y3(:,8).*V3,t3,y3(:,9).*V3)
title('Evolució del nombre de mols')
grid on
xlabel('Temps (s)')
ylabel('Producció (mols)')
legend('Npara','Norto','Ndinitro','Nfenol','Nacid_nitros','Ngasos')

figure(8)
plot(t3,y3(:,1),t3,y3(:,8),t3,y3(:,9))
title('Evolució de les concentracions')

```

```

grid on
xlabel('Temps (s)')
ylabel('Concentracions (mol/litres)')
legend('Cnitric','C_H_N_O_2','C_N_2_O_4')

%% -----
%%
%% -----REFRIGERACIÓ-----
%%
%% -----
%%

opcions2=odeset('AbsTol',1e-06,'RelTol',1e-06,'MaxStep',0.5);

[t2,y2]=ode15s(@balancos2,[5400 7200],[y3(end,1) y3(end,2) y3(end,3)
y3(end,4) y3(end,5) y3(end,6) y3(end,7) y3(end,8) y3(end,9)
y3(end,10)],opcions2);

V2=V3(end);

T_sortida_refrigerant2=Trefrigerant-(T2-Trefrigerant).*exp(-
U.*A./mc2./cp_refrigerant);

%-----> FUNCió DELS BALANÇOS (EQUACIONS DIFERENCIALS)

function yprima2=balancos2(t2,y2)

    V2=V3(end);

    yprima2=zeros(10,1);

    %A=40;

    Ffenol2=0;

```

%----> Concentracions (mol/litre) i Nombre de mols (mols) de tots els components

%(Definició de cada component)%

Cnitric2=y2(1);Nnitric2=Cnitric2.*V2;

Cfenol2=y2(2);Nfenol2=Cfenol2.*V2;

Cpara2=y2(3);Npara2=Cpara2.*V2;

Corto2=y2(4);Norto2=Corto2.*V2;

Cdinitro2=y2(5);Ndinitro2=Cdinitro2.*V2;

Caigua2=y2(6);Naigua2=Caigua2.*V2;

Csulfuric2=y2(7);Nsulfuric2=Csulfuric2.*V2;

Cnitros2=y2(8);Nnitros2=Cnitros2.*V2;

Cnitrosos2=y2(9);Nnitrosos2=Cnitrosos2.*V2;

T2=y2(10);

%-----> Definició de paràmetres necessaris pel balanç d'energia

Qr2=mc2.*cp_refrigerant.*(Trefrigerant-T2).*(1-exp(-
U.*A./mc2./cp_refrigerant));

T_sortida_refrigerant2=T2-(T2-Trefrigerant).*exp(-
U.*A./mc2./cp_refrigerant);

Ncp_total2=cp_productes.*(Npara2+Norto2+Ndinitro2)+cpaigua.*Naigua2+cpnitric.*Nnitric2+cpsulfuric.*Nsulfuric2;

%----->Balanços al reactor

yprima2(1)=0;

yprima2(2)=0;

yprima2(3)=0;

yprima2(4)=0;

yprima2(5)=0;

```

        yprima2(6)=0;
        yprima2(7)=0;
        yprima2(8)=0;
        yprima2(9)=0;
        yprima2(10)=Qr2./Ncp_total2;

    end

% %% _____ GRÀFICS _____ %%

%----->Temperatura vs temps (Balanç d'energia)
figure(9)
plot(t,y(:,10),t3,y3(:,10),t2,y2(:,10))
title('Evolució de la temperatura')
legend('Temperatura','Temperatura sortida refrigerant')
grid on
xlabel('Temps (s)')
ylabel('Temperatura (K)')

figure(10)
plot(t,y(:,6),t3,y3(:,6),t2,y2(:,6))

Balancos=[y(1,1)*V(1)*PM_nitric/1000,y3(end,1)*V3(end)*PM_nitric/1000;
        y(1,2)*V(1)*PM_fenol/1000,y3(end,2)*V3(end)*PM_fenol/1000
        y(1,3)*V(1)*PM_para/1000,y3(end,3)*V3(end)*PM_para/1000;
        y(1,4)*V(1)*PM_orto/1000,y3(end,4)*V3(end)*PM_orto/1000;
        y(1,5)*V(1)*PM_dinitro/1000,y3(end,5)*V3(end)*PM_dinitro/1000;

```



```

y(1,6)*V(1)*PM_aigua/1000,y3(end,6)*V3(end)*PM_aigua/1000;
y(1,7)*V(1)*PM_sulfuric/1000,y3(end,7)*V3(end)*PM_sulfuric/1000;
y(1,8)*V(1)*PM_nitros/1000,y3(end,8)*V3(end)*PM_nitros/1000;
y(1,9)*V(1)*PM_nitrosos/1000,y3(end,9)*V3(end)*PM_nitrosos/1000]

%% _____Tancament del programa_____ %%

end

```

11.19.2. Reactor d'hidrogenació

```

function reaccio_2
clear
clc
close all
disp('RDTA per a la segona reaccio treballant en isotherm T=353K')

%% -----Subindexs components-----
% a= hidrogen (X refeida a aquest)
% b= p-nitrophenol
% c= p-aminophenol
% d= aigua

%% -----Coeficients estequiometrics-----
va=-3;
vb=-1;
vc=1;
vd=2;

%% -----Parametres fixats a la T=353K-----
T=353; %K
w=0.3; %kg/m3
k1=64.484; %(m3/kg)(m3/kmol.s)
Pa=3; %MPa
Bo=0.90; %kmol/m3 3384/139.11/27
H=3.734e-2; %kmol/(m3.MPa)
Ao=H*Pa; %kmol/m3
Ka=1.029e4; %m3/kmol
Kb=4.321e3; %m3/kmol
AH=-542.09/abs(va); %KJ/mol (entalpia reacció)
Co=0; %kmol/m3
Do=2.81; %kmol/m3 1368kg/18/27

%% ----Suposicions-----
A=Ao; %kmol/m3
V=27; %m3

```

```

Volum_reaccio_en_m3=V

%% d i h a partir de volum reaccio
d_m=((V*4)/(pi*1.5))^(1/3); %metres de diàmetre
h_m=1.5*d_m; %metres d'alçada

%% -----Dimensions reactor-----
diàmetre_m=3; %m de diàmetre
alsada_m=1.5*diàmetre_m; %metres d'alçada
Volum_reactor=pi/4*diàmetre_m^2*alsada_m %m3

%%-----Condicions inicials i temps de simulació-----
conversio_inicial=0;
calor_produïda_inicial=0; %KJ
co=[conversio_inicial,calor_produïda_inicial];

temps_simu=[0 4200]; %en segons

%% -----ODE-----
i=0; %per poder treure fora dq/dt
opcions=odeset('AbsTol', 1e-5, 'RelTol',1e-5,'MaxStep',1);
[tm,ym]=ode45(@rdta,temps_simu,co,opcions);
tm=tm/60; %minuts
X=ym(:,1);
q=ym(:,2); %KJ
dt=dt/60; %minuts

A=A*ones(1,length(tm)); %kmol/m3
B=Bo-vb/va*Ao*X; %kmol/m3
C=Co-vc/va*Ao*X; %kmol/m3
D=Do-vd/va*Ao*X; %kmol/m3
concentracio_paminophenol_sortida_molar=max(C)

%% -----Refrigeració-----

%subindexs:
% Mc=Mitja canya
% serp=Serpenti

percent=0.40; % x mitja canya
Cp_aigua=4.18; %KJ/(Kg°K)
Tent_Mc=273+25; %°K
Tsort_Mc=273+60; %°K
Tent_serp=273+25; %°K
Tsort_serp=273+60; %°K
AT_Mc=Tsort_Mc-Tent_Mc; %salt de 35°C
AT_serp=Tsort_serp-Tent_serp; %salt de 35°C
m_Mc=percent*dq./(Cp_aigua.*AT_Mc); %kg/s
m_serp=(1-percent)*dq./(Cp_aigua.*AT_serp); %kg/s

x_Mc=dt.*60;
y_Mc=m_Mc;
kg_refrig_Mc=trapz(x_Mc,y_Mc);

```

```

x_serp=dt.*60;
y_serp=m_serp;
kg_refrig_serp=trapz(x_serp,y_serp);

m3_requeriments_aigua_refrig=(kg_refrig_Mc+kg_refrig_serp)/1000

U_Mc=500*4.18/3600; %KW/(m2*K)
U_serp=1000*4.18/3600; %KW/(m2*K)
ATml_Mc=((T-Tent_Mc)-(T-Tsort_Mc))/log((T-Tent_Mc)/(T-Tsort_Mc)); %°K
ATml_serp=((T-Tent_serp)-(T-Tsort_serp))/log((T-Tent_serp)/(T-Tsort_serp)); %°K
area_besc_Mc= percent*dq./(U_Mc*ATml_Mc); %m2
area_besc_serp=(1-percent)*dq./(U_serp*ATml_serp); %m2

%% -----Arees-----
area_max_necessaria_Mc=max(area_besc_Mc) %m2
area_max_necessaria_serp=max(area_besc_serp); %m2
area_total_besc=area_max_necessaria_Mc+area_max_necessaria_serp; %m2

area_besc_reactor=diametre_m*alsada_m*pi % comprovar q s mes gran q a.
max. mitja canya

%% -----Dimensions serpenti-----
Q_refrig_serp=max(m_serp)/1000; % Cabal màxim
refrigerant (m3/s)
di_serp=80e-3; % Diàmetre intern del
serpenti (m)
gruix=2e-3; % gruix serpenti (m)
de_serp=di_serp+2*gruix; % Diàmetre extern del
serpenti (m)
Apas_serp=pi*((di_serp)^2)/4 % Àrea de pas del
serpenti (m2)
L_serp=area_max_necessaria_serp/(pi*((di_serp+de_serp)/2)) % Longitud
serpenti (m)
R=0.9*diametre_m/2 % Radi de la hèlix
del serpenti (m)
num_voltes_serp=L_serp/(2*pi*R) % Número de voltes
del serpenti
espatiat_serp_cm=(alsada_m-num_voltes_serp*(di_serp+2*gruix)-
2*0.1*alsada_m)/num_voltes_serp*100 %en cm
Volum_serp=L_serp*Apas_serp % Volum del serpenti
(m3)
velocitat_refrig_serp=m_serp./1000./Apas_serp; % vector de velocitat
del refrigerant del serpenti(m/s)

%% Dimensions mitja canya
di_Mc=0.08; % Diàmetre intern de
la mitja canya (m)
gruix_Mc=2e-3; % gruix mitja canya
(m)
de_Mc=di_Mc+2*gruix_Mc; % Diàmetre extern
mitja canya (m)
Apas_Mc=pi*((di_Mc)^2)/8 % Àrea de pas de la
mitja canya (m2)

```

```

Q_refrig_Mc=max(m_Mc)/1000; % Cabal màxim
refrigerant (m3/s)
velocitat_refrig_Mc=m_Mc./1000./Apas_Mc; % vector de velocitat
del refrigerant de la mitja canya (m/s)
L_Mc=area_max_necessaria_Mc/(pi*((di_Mc+de_Mc)/2)) % Longitud mitja
canya (m)
gruix_cilindre=0.04; % normativa ASME
alsada_cilindre=3.9; % h-60 cm de fons
toriesfèric
diametre_ext_cil=diametre_m+2*gruix_cilindre % diàmetre extern del
cilindre
num_voltes_Mc=L_Mc/(pi*diametre_ext_cil) % Número de voltes de la
mitja canya
espaiat_Mc_m=(alsada_cilindre-(num_voltes_Mc*de_Mc))/num_voltes_Mc
% 39 mm
Volum_Mc=L_Mc*Apas_Mc % Volum mitja canya (m3)

%% Volum agitador
V_agitador=Volum_reactor-V-Volum_serp

%% -----Catalitzador-----

Kg_catalitzador_necessari=V*w %kg

%% -----Plots-----
figure(1);
plot(tm,A,'k',tm,B,'g',tm,C,'r');
legend('A=hidrogen','B=p-nitrophenol','C=p-aminophenol',2);
hold on; grid on;
title('Concentració vs temps');
xlabel('Temps (minuts)');
ylabel('Concentració (Kmol/m3)');

figure(2);
plot(tm,q,'b');
hold on; grid on;
title('Calor generat acumulat vs temps');
xlabel('Temps (minuts)');
ylabel('Calor generat acumulat (KJ)');

figure(3);
plot(dt,dq,'b');
hold on; grid on;
title('calor generat vs temps');
xlabel('Temps (minuts)');
ylabel('Calor generat (KJ/s)');

figure(4);
plot(dt,m_Mc,'b',dt,m_serp,'r');
hold on; grid on;
title('cabal aigua refrig. vs temps');
xlabel('Temps (minuts)');
ylabel('Cabal aigua (Kg/s)');
legend('mitja canya','serpenti');

```

```

figure(5);
plot(dt,area_besc_Mc,'b');
hold on; grid on;
plot(dt,area_besc_serp,'r');
title('Àrea necessària de bescanvi vs temps');
xlabel('Temps (minuts)');
ylabel('Àrea bescanvi (m^2)');
legend('mitja canya','serpentí');

figure(6);
plot(dt,velocitat_refrig_Mc,'b');
hold on; grid on;
plot(dt,velocitat_refrig_serp,'r');
title('velocitat aigua refrig. vs temps');
xlabel('Temps (minuts)');
ylabel('velocitat aigua refrig. (m/s)');
legend('mitja canya','serpenti');

figure(7);
plot(tm,D,'b');
legend('D=aigua',2);
hold on; grid on;
title('Concentració aigua vs temps');
xlabel('Temps (minuts)');
ylabel('Concentració aigua (Kmol/m3)');

%% Equacions diferencials del model
function dydt=rdta(t,y)
X=y(1);
q=y(2); %KJ
B=Bo-vb/va*Ao*X; %kmol/m3
r=w*k1*A*B/(1+Ka*A+Kb*B); %kmol/(m3*s)
dydt(1,1)=-(va)*r/Ao; %correspon a dXdt
dydt(2,1)=(Ao*10^3*V)/va*AH*dydt(1); %correspon a dqdt (KJ/s)
i=i+1; %contador

dq(i,1)=dydt(2,1); %per treure fora el vector dqdt (KJ/s)
dt(i,1)=t; %segons
    if i>1 & t<=dt(i-1,1)
        i=i-1;
    end;
end
end

```

11.19.3. Reactor d'acetilació

```

function r3acetic
clear
clc
close all
disp('RDTA per a la tercera reacció')

%% -----Subindexs components-----

```

```

% a= P-aminophenol (X referida a aquest)
% b= Anhidrid Acètic
% c= Paracetamol
% d= Àcid Acètic

%% -----Coeficients estequiometrics-----
va=-1;
vb=-1;
vc=1;
vd=1;

%% -----Suposicio-----
V=11; %m3

%% -----Parametres-----
To=60+273; %K
PMa=109.13; %kg/kmol
PMb=102.09; %kg/kmol
densa=1130; %kg/m3
densb=1082; %kg/m3
Ao=2.18; %kmol/m3
Bo=2.8; %kmol/m3
Co=0; %kmol/m3
Do=1.74; %kmol/m3
AH=-28.65; %KJ/mol (entalpia reacció)
K_art=2.6180/3600; %m3/(kmol*s)
K_lab=18.9795; %m3/(kmol*s)
Arh=polyfit([1/(110+273) 1/(60+273)], [log(K_lab) log(K_art)],1)
Ea_R=-Arh(1)
preA=exp(Arh(2))

Nao=Ao*V %kmol
Cpa=150.42;%KJ/(kmol*K)

Nbo=Bo*V; %kmol
Cpb=168.2;%KJ/(kmol*K)

anhidrid_m3=Bo*V*PMb/densb %m3
disolvent_m3=V-anhidrid_m3 %m3

Cpacetic=123.3; %KJ/(kmol*K)
PMacetic=60.05; %kg/kmol
densacetic=1049; %kg/m3
Nacetic=disolvent_m3*0.1*densacetic/PMacetic %kmol

Cpaigua=75.3; %KJ/(kmol*K)
densaigua=1000; %kg/m3
PMaigua=18; %kg/kmol
Naigua=disolvent_m3*0.9*densaigua/PMaigua %kmol
molsxcp=(Nao*Cpa+Nbo*Cpb+Naigua*Cpaigua+Nacetic*Cpacetic)
J=Nao*AH*1000/(va*(Nao*Cpa+Nbo*Cpb+Naigua*Cpaigua+Nacetic*Cpacetic))

%% d i h a partir de volum reaccio
d_m=((V*4)/(pi*1.5))^(1/3); %metres de diámetro
h_m=1.5*d_m; %metres d'alçada

```

```

%% -----Dimensions reals reactor-----
diametre_m=2.5;
alsada_m=1.5*diametre_m;

Volum_reactor_m3=pi/4*diametre_m^2*alsada_m %m3

volum_espai_mort_i_agitador=Volum_reactor_m3-V

%% -----Condicions inicials i temps de simulació-----
conversio_inicial=0;
co=[conversio_inicial];

temps_simu=[0 600]; %en segons

%% -----ODE-----
i=0; %per poder treure fora dq/dt
opcions=odeset('AbsTol', 1e-5, 'RelTol',1e-5,'MaxStep',1);
[tm,ym]=ode15s(@rdta,temps_simu,co,opcions);
tm=tm/60;
X=ym(:,1);

%% -----Plots-----

figure(1)
plot([(60+273):(110+273)],preA.*exp(-Ea_R./[(60+273):(110+273)]))
title('K vs T');
hold on; grid on;
xlabel('T (°K)');
ylabel('K (m3/kmol·s)');

figure(2);
plot(tm,X,'r');
title('conversio vs temps');
hold on; grid on;
xlabel('Temps (minuts)');
ylabel('conversió');

A=Ao.*(1-X);
B=Bo-vb./va.*Ao.*X;
C=Co-vc./va.*Ao.*X;
D=Do-vd./va.*Ao.*X;

figure(3);
plot(tm,A,'b',tm,B,'g',tm,C,'r',tm,D,'k');
legend('p-aminophenol','anhídrid acètic','paracetamol','àcid acètic',2);
hold on; grid on;
title('concentracio vs temps');
xlabel('Temps (minuts)');
ylabel('Kmol/m3');

T=J.*X+To;
figure(4);
plot(tm,T);
hold on; grid on;

```

```

title('T vs temps');
xlabel('temps (minuts)');
ylabel('T (°K)');

%% -----Equacions diferencials del model-----

function dydt=rdta(t,y)
X=y(1);
T=J.*X+To;
K=preA.*exp(-Ea_R./T); %m3/(kmol*s)
r=K.*(Ao-Ao.*X).*(Bo-Ao.*X);
dydt=-va./Ao.*r;
end

-----
end

```

11.19.4. Cristal·litzador Z-401 i Z-402

```

%% _____DEFINICIÓ DE PARÀMETRES_____ %%
%----->PESOS MOLECULARS (g/mol)

PM_sulfuric=98.07;
PM_nitros=47.013;
PM_nitric=63.013;
PM_fenol=94.113;
PM_orto=139.11;
PM_para=139.11;
PM_dinitro=184.11;
PM_aigua=18.015;
PM_nitrosos=2*14+4*16;

%-----> CONCENTRACIONS I VOLUMS INICIALS

Maigua0=9106.6; % Massa d'aigua inicial al cristal·litzador
(kg)

ro_aigua=1; % Densitat aigua (Kg/litre)

V_inicial=Maigua0/ro_aigua; % Volum inicial sense aigua (litres)

```



```
% Concentració inicial de reactius----> mols/litres
Cnitric0=0;
Cfenol0=0;
Cpara0=3420.45*1000/PM_para/V_inicial;
Corto0=0;
Cdinitro0=0;
Csulfuric0=0;
Cnitros0=0;
Cnitrosos0=0;
Naigua0=Maigua0*1000/PM_aigua;
Caigua0=Naigua0/V_inicial;

%-----> DADES BALANÇ ENERGIA
U=600; % Coeficient de bescanvi de calor
(J/m^2/s/K)
U1=500;

Trefrigerant=273+25; % Temperatura d'entrada del fluid
refrigerant (K)
Trefrigerant1=273-10;
Tr1=Trefrigerant;
Tr2=Trefrigerant+10;
Tr3=Trefrigerant1;
Tr4=Trefrigerant1+5;

TR=273+45; %% primer salt // temperatura entrada al segon
cristalitzador
TR1=273+1;

T0=273+93; %% temperatura entrada al primer cristalitzador
ATML=abs((TR-Tr1)-(Tr2-T0))/(log((TR-Tr1)/(Tr2-T0)));
ATML1=abs((TR1-Tr3)-(Tr4-TR))/(log((TR1-Tr3)/(Tr4-TR)));

cpfenol=127.21; % Capacitats calorífiques (J/(mol·K))
cpnitric=123.1;
```

```

cpaigua=75.4;
cpnitrosos=15;
cp_productes=144;
cpnitros=123.1;
cpsulfuric=139;
cp_refrigerant=4180;          %% Fluid refrigerant aigua  % J/Kg·K
cp_refrigerant1=3696.61;     %% Fluid refrigerant aigua glicolada

mc=4
mc1=9
A=12
A1=20

%% _____ FUNCIO DE BALANÇOS _____ %%
opcions2=odeset('AbsTol',1e-06,'RelTol',1e-06,'MaxStep',1);
[t,y]=ode15s(@balancos,[(3600*0.5) (3600*3.5)],[Cnitric0 Cfenol0 Cpara0
Corto0 Cdinitro0 Caigua0 Csulfuric0 Cnitros0 Cnitrosos0 T0],opcions2);
V=V_inicial;
V_final=V(end)/1000
    QR=Maigua0*cp_refrigerant*(T0-TR)/(3600*3)
    A_minim=QR/(U*ATML)
    mc_minim=QR/(cp_refrigerant*(Tr2-Tr1))
T=y(:,10);
T_sortida_refrigerant=T-(T-Trefrigerant).*exp(-U.*A./mc./cp_refrigerant);
Mitjana_aigua=mean(T_sortida_refrigerant)

%-----> FUNCIO DELS BALANÇOS (EQUACIONS DIFERENCIALS)
function yprima=balancos(t,y)
V=V_inicial;
yprima=zeros(10,1);
%A=40;

```

%----> Concentracions (mol/litre) i nombre de mols (mols) de tots els components

```
Cnitric=y(1);Nnitric=Cnitric.*V;
Cfenol=y(2);Nfenol=Cfenol.*V;
Cpara=y(3);Npara=Cpara.*V;
Corto=y(4);Norto=Corto.*V;
Cdinitro=y(5);Ndinitro=Cdinitro.*V;
Caigua=y(6);Naigua=Caigua.*V;
Csulfuric=y(7);Nsulfuric=Csulfuric.*V;
Cnitros=y(8);Nnitros=Cnitros.*V;
Cnitrosos=y(9);Nnitrosos=Cnitrosos.*V;
T=y(10);
```

%-----> Definició de paràmetres necessaris pel balanç d'energia

```
QR=Maigua0*cp_refrigerant*(T0-TR)/(3600*3);
A_minim=QR/(U*ATML);
mc_minim=QR/(cp_refrigerant*(Tr2-Tr1));
```

```
Qr=mc.*cp_refrigerant.*(Trefrigerant-T).*(1-exp(-
U.*A./mc./cp_refrigerant));
```

```
T_sortida_refrigerant=T-(T-Trefrigerant).*exp(-
U.*A./mc./cp_refrigerant);
```

```
Ncp_total=cp_productes.*Npara+cpaigua.*Naigua;
```

%----->Balanços al reactor

```
yprima(1)=0;
yprima(2)=0;
yprima(3)=0;
yprima(4)=0;
yprima(5)=0;
yprima(6)=0;
yprima(7)=0;
yprima(8)=0;
```

```

    yprima(9)=0;

    yprima(10)=Qr./Ncp_total;

    %yprima(10)=-QR./Ncp_total;

end

[t1,y1]=ode15s(@balancos1,[3600*4.5 3600*7.5],[Cnitric0 Cfenol0 Cpara0
Corto0 Cdinitro0 Caigua0 Csulfuric0 Cnitros0 Cnitrosos0
y(end,10)],opcions2);

    y(end,10)

    QR1=Maigua0*cp_refrigerant*(TR-TR1)/(3600*3)

    A1_minim=QR1/(U1*ATML1)

    mcl_minim=QR1/(cp_refrigerant1*(Tr4-Tr3))

T1=y1(:,10);

T_sortida_refrigerant1=T1-(T1-Trefrigerant1).*exp(-
U1.*A./mcl./cp_refrigerant1);

Mitjana_aigua_glicolada=mean(T_sortida_refrigerant1)

y1(end,10)

%-----> FUNCIO DELS BALANÇOS (EQUACIONS DIFERENCIALS)

function yprima1=balancos1(t1,y1)

V1=V(end);

yprima1=zeros(10,1);

%A=40;

%----> Concentracions (mol/litre) i Nombre de mols (mols) de tots els
components

%(Definició de cada component)%

Cnitric1=y1(1);Nnitric1=Cnitric1.*V1;

Cfenol1=y1(2);Nfenol1=Cfenol1.*V1;

Cpara1=y1(3);Npara1=Cpara1.*V1;

Cortol=y1(4);Nortol=Cortol.*V1;

Cdinitro1=y1(5);Ndinitro1=Cdinitro1.*V1;

Caigua1=y1(6);Naigua1=Caigua1.*V1;

```

```

Csulfuric1=y1(7);Nsulfuric1=Csulfuric1.*V1;
Cnitros1=y1(8);Nnitros1=Cnitros1.*V1;
Cnitrosos1=y1(9);Nnitrosos1=Cnitrosos1.*V1;
T1=y1(10);

%-----> Definició de paràmetres necessaris pel balanç d'energia

QR1=Maigua0*cp_refrigerant*(TR-TR1)/(3600*3);
A1_minim=QR1/(U1*ATML1);
mcl_minim=QR1/(cp_refrigerant1*(Tr4-Tr3));

Qr1=mcl.*cp_refrigerant1.*(Trefrigerant1-T1).*(1-exp(-
U1.*A./mcl./cp_refrigerant1));

T_sortida_refrigerant1=T1-(T1-Trefrigerant1).*exp(-
U1.*A./mcl./cp_refrigerant1);

Ncp_total1=cp_productes.*Nparal1+cpaigua.*Naigua1;

%----->Balanços al reactor

yprimal(1)=0;
yprimal(2)=0;
yprimal(3)=0;
yprimal(4)=0;
yprimal(5)=0;
yprimal(6)=0;
yprimal(7)=0;
yprimal(8)=0;
yprimal(9)=0;
yprimal(10)=Qr1./Ncp_total1;

end

```

```

%% _____ GRÀFICS _____ %%

% %----->Temperatura vs temps (Balanç d'energia)

Balancos=[y(1,1)*V(1)*PM_nitric/1000,y(end,1)*V(end)*PM_nitric/1000;
y(1,2)*V(1)*PM_fenol/1000,y(end,2)*V(end)*PM_fenol/1000
y(1,3)*V(1)*PM_para/1000,y(end,3)*V(end)*PM_para/1000;
y(1,4)*V(1)*PM_orto/1000,y(end,4)*V(end)*PM_orto/1000;
y(1,5)*V(1)*PM_dinitro/1000,y(end,5)*V(end)*PM_dinitro/1000;
y(1,6)*V(1)*PM_aigua/1000,y(end,6)*V(end)*PM_aigua/1000;
y(1,7)*V(1)*PM_sulfuric/1000,y(end,7)*V(end)*PM_sulfuric/1000;
y(1,8)*V(1)*PM_nitros/1000,y(end,8)*V(end)*PM_nitros/1000;
y(1,9)*V(1)*PM_nitrosos/1000,y(end,9)*V(end)*PM_nitrosos/1000];

figure(1)

plot(t,T,t,T_sortida_refrigerant,t1,T1,
t1,T_sortida_refrigerant1,t,Tr1,t,Tr2,t1,Tr3,t1,Tr4)

title('Evolució de la temperatura')

legend('Temperatural','Temperatura sortida
refrigerant1','Temperatura2','Temperatura sortida refrigerant2')

grid on

xlabel('Temps (s)')

ylabel('Temperatura (K)')

%% _____Tancament del programa_____ %%

end

```

12. BIBLIOGRAFIA

- N.J, Hoboken, Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, 4th Edition (2004)
- R.H. Perry i D.W. Green, *Perry's Chemical Engineering Handbook*, McGraw- Hill (1999)
- E.E Ludwig, *Applied process design for chemical and petrochemical plants*, Butterworth-Heinemann, 3era edició (1999).
- C. Branan, *Rules of thumb for chemical engineers*, ELSEVIER, 4ª edició, 2005
- R.K Sinnott, *Chemical Engineering Design, Coulson & Richardson's Chemical Engineering VOL.6*, Butterworth-Heinemann (1999)
- H. Hartmann et al. *Numerical Simulation of Solubility Process in a Stirred Tank reactor*, Computational Fluid Dynamics in Chemical Reactor Engineering IV (2005)
- E.L. Paul, *Handbook of Industrial Mixing: Science and Practice*, John Wiley & Sons (2004)
- A. Mermann, *Crystallization Technology Handbook*, Second edition.
- J. W. Mullin, *Crystallization*. Butterworth-Heinemann Ltd. 3a edició. Ed. Oxford (1993).
- J. Happel, D. J. Jordan, *Economía de los procesos químicos*, Ed. Reverte, Barcelona (1981)
- Elementos de ingeniería de las reacciones químicas /H. Scott Fogler ; traducción, Roberto Luis Escalona García ; revisión técnica, Jorge Fernando Ramírez Solís, Fogler, H. Scott., ,ISBN:9702600790
- Ingeniería de las reacciones químicas /Octave Levenspiel., Levenspiel, Octave., 3a ed. ,ISBN:9681858603
- Elements of chemical reaction engineering /H. Scott Fogler., Fogler, H. Scott., 4th ed.,ISBN:0130473944 (alk. paper).
- Procesos de transferencia de calor. Donald Q. Kern. Trigésima primera impresión México, 1999.
- Transferencia de calor. J. P. Holman. Décima impresión México, 1999.
- Unit operations of chemical engineering. Warren L McCabe.

-www.icis.com/staticpages

-www.chemweek.com

-www.chemfinder.com

-www.icispricing.com