

$$Q = m_{\text{toluè}} \cdot C_{p_{\text{toluè}}} \cdot \Delta T \quad \text{Equació 12.6.1.16}$$

on:

- $m_{\text{toluè}}$  = cabal màssic de toluè (kg/h)
- $C_{p_{\text{toluè}}}$  = capacitat calorífica del toluè (kJ/kg·K)
- $\Delta T$  = salt tèrmic del toluè entre l'entrada i la sortida. El salt tèrmic és de 3°C.

$$m_{\text{toluè}} = \frac{4,85 \cdot 10^7 \text{ J/h}}{\frac{1694 \text{ J}}{\text{kg}} \cdot 3} = 9.537,57 \text{ kg/h}$$

Amb el balanç de matèria i d'energia s'han obtingut les dades necessàries per fer el disseny funcional del reactor on es calcularà el seu volum i el nombre de tubs que el formen.

#### 12.6.1.4 Disseny funcional

El disseny funcional del reactor permetrà conèixer el seu volum així com el nombre de tubs que el formen. El volum es pot calcular segons l'equació 12.6.1.17, el cabal d'entrada s'ha calculat en l'apartat del balanç de matèria i el temps de residència és conegut (1,5 segons).

S'ha aplicat un factor de seguretat per al sobredimensionament dels reactors del 35% ja que la cinètica és desconeguda i les dades per al disseny no s'han pogut comprovar de forma empírica.

$$V = Ql \cdot \tau \quad \text{Equació 12.6.1.17}$$

on:

- $\tau$  = temps de residència (s)
- $V$  = volum del reactor ( $\text{m}^3$ )
- $Ql$  = cabal d'entrada al reactor ( $\text{m}^3/\text{seg}$ )

$$V = \frac{0,190 \text{ m}^3}{\text{s}} \cdot 1,5 \text{ segons} \cdot 1,35 = 0,40 \text{ m}^3$$

Amb el diàmetre i la longitud dels tubs es calcula el nombre de tubs necessaris per disposar del volum de reactor calculat i es comprova que l'àrea que aquests proporcionen és suficient pel bescanvi de calor.

Es pren la decisió d'utilitzar tubs de 4 polzades de diàmetre i 2 metres de longitud, per tal d'optimitzar al màxim aquest nombre.

$$\mathbf{Número\ de\ tubs} = \frac{\mathbf{Volum\ total\ reactor}}{\mathbf{Volum\ d'untub}} \quad \mathbf{Equació\ 12.6.1.18}$$

$$\mathbf{Número\ de\ tubs} = \frac{0,4m^3}{\frac{\pi}{4} \cdot 0,102^2m \cdot 2m} = \mathbf{25\ tubs}$$

$$\mathbf{Àrea\ d'un\ tub} = \pi \cdot 0,102m \cdot 2m = 0,8m^2$$

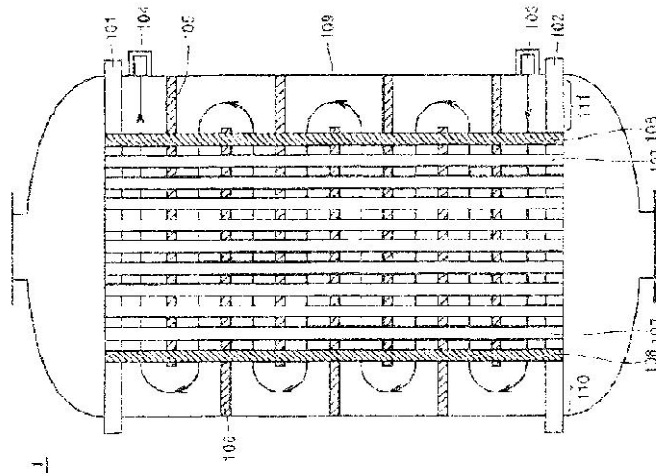
$$\mathbf{Àrea\ total\ disponible} = 0,64m^2 \cdot 25 = \mathbf{16m^2}$$

Amb el nombre de tubs determinat i després de comprovar que l'àrea de bescanvi que aquests proporcionen permet treballar amb un marge de bescanvi de calor, es passa a fer el disseny mecànic de l'equip.

#### 12.6.1.5 Disseny mecànic

El disseny mecànic del reactor multitubular es realitza combinant el mètode de Kern, per al disseny de bescanviadors de carcassa i tubs, i el codi ASME, per al disseny d'equips a pressió, per calcular els espessors tant de tubs com de carcassa en les condicions de treball.

Per l'interior dels tubs hi circula la mescla gasosa de reacció i per carcassa el toluè encarregat d'emportar-se la calor de reacció.



**Figura 12.6.1.3** Esquema d'un reactor multitubular

En primer lloc, a partir de les condicions d'operació, es defineixen la pressió i la temperatura de disseny i es decideix el material del que es farà el reactor tenint en compte les característiques dels fluids que hi circulen.

- **Pressió de disseny:** la pressió de disseny serà igual per al fluid de carcassa i per al de tubs i es calcula aplicant la norma següent:

$$\text{Pressió de disseny} = \max(1,1 \cdot P. \text{operació}, P. \text{operació} + 2\text{atm})$$

$$\text{Pressió de disseny} = \max(1,1\text{atm} + 3\text{atm}) = 3\text{atm}$$

- **Temperatura de disseny:** la temperatura de disseny s'estableix 20°C per sobre de la temperatura d'operació del reactor i és lleugerament diferent en el cas de tubs i en el de carcassa:

$$\text{Temperatura de disseny tubs} = (260^{\circ}\text{C} + 20^{\circ}\text{C}) = 280^{\circ}\text{C}$$

$$\text{Temperatura de disseny carcassa} = (38^{\circ}\text{C} + 20^{\circ}\text{C}) = 58^{\circ}\text{C}$$

S'utilitza som a temperatura de disseny la més desfavorable, en aquest cas la més alta:

*Temperatura de disseny = 280°C*

- **Material:** Per decidir quin és el millor material per aquest reactor cal tenir en compte que es treballa amb HCl i la corrosió que aquest produeix és elevada, consultant la taula de la figura 12.6.1.4 s'escull Hasteloy B-2 amb una corrosió menor de 0,508mm/any.

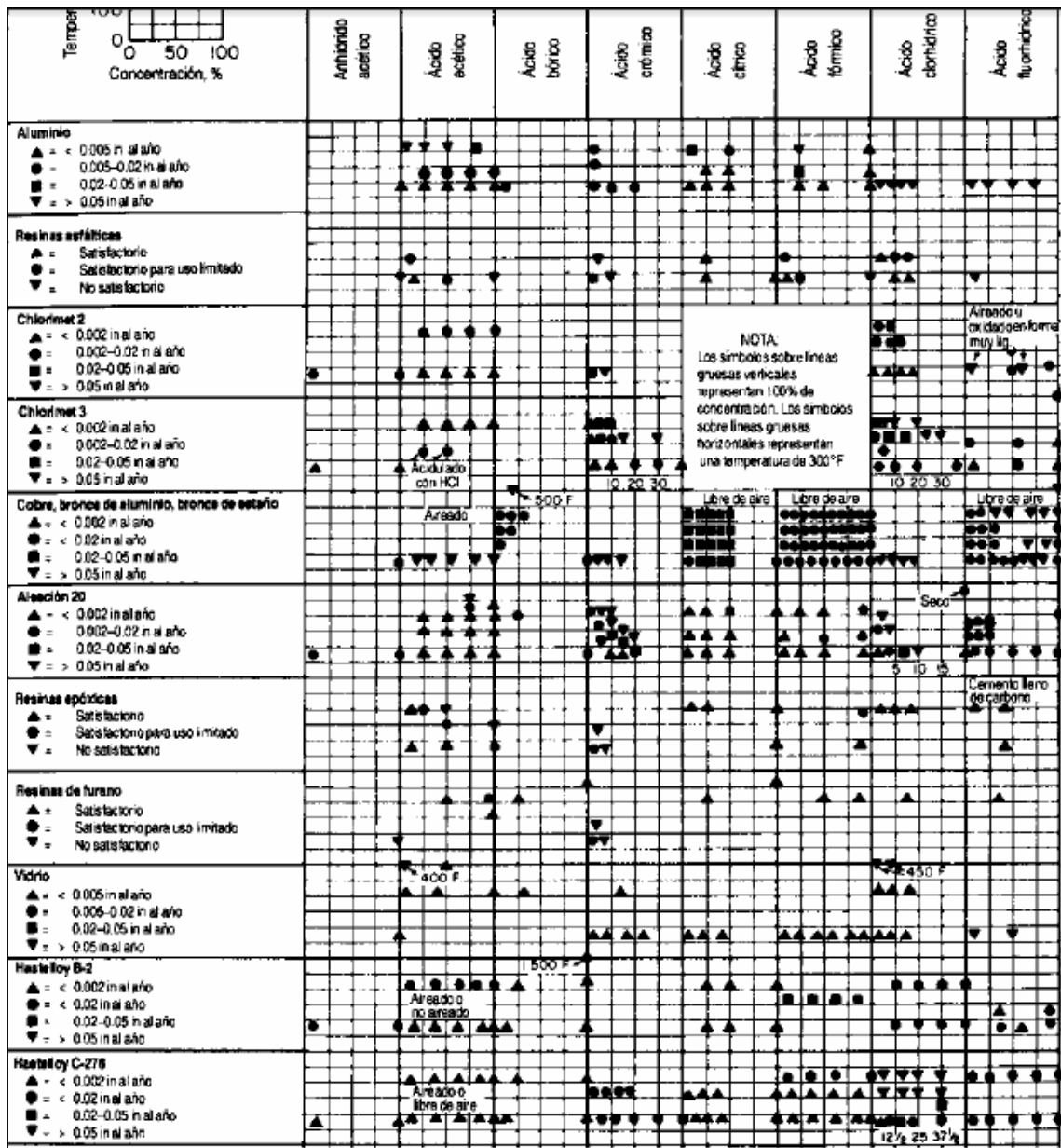


Figura 12.6.1.4 Dades detallades de corrosió en materials de construcció [Perry's Handbook]

Amb les condicions de disseny definides i les dimensions dels tubs fixades es pot començar amb el disseny aplicant el mètode de Kern i la normativa ASME.

- Característiques dels tubs: la longitud i el diàmetre intern dels tubs s'ha fixat en l'apartat del disseny funcional del reactor. Amb la normativa ASME es calcula el seu espessor i per tant el diàmetre extern.

$$\text{Longitud tubs} = 2m$$

$$\text{Diàmetre intern de tubs} = 4 \text{ polzades} = 0,102m$$

$$\text{espessor tubs} = \frac{P_t \cdot D_{int}}{2 \cdot (S \cdot E - 0,6 \cdot P_t)} + CA \quad \text{Equació 12.6.1.19}$$

on:

- $P_t$  = pressió interna dels tubs (bar) = 3,03
- $D_{int}$  = diàmetre intern (mm) = 102
- $E$  = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)
- $S$  = càrrega admissible del material (bar) = 7583,40 bar

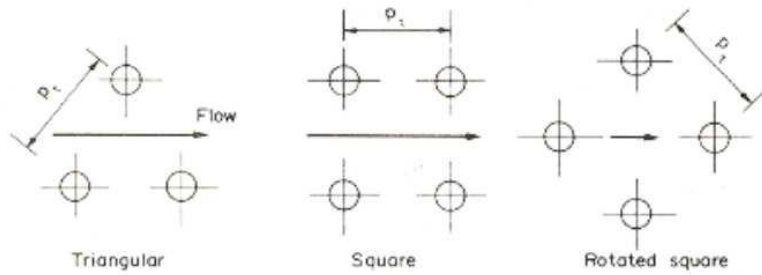
La tolerància de fabricació per aquest cas, un cilindre, és nul·la, el sobre espessor per corrosió del material és de 0,508mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobreespessor serà 7,62 mm.

El valor d'espessor obtingut és de 0,02mm, tenint en compte el sobreespessor l'espessor dels tubs serà de 7,68mm i per tal d'evitar costos de fabricació per a gruixos específics s'utilitza un valor de 8mm.

$$\text{espessor dels tubs} = 8mm.$$

$$\text{diàmetre extern dels tubs} = 0,101m + (2 \cdot 0,008mm) = 0,136m.$$

- Distribució dels tubs: la distribució dels tubs segueix tres esquemes típics: triangular, quadrat i romboïdal. En aquest cas s'ha escollit un pitch (distància entre els centres de dos tubs consecutius) triangular degut a que aquesta disposició proporciona altes velocitats de transferència de calor. El pitch recomanat és de 1,25 vegades el diàmetre extern del tub.



**Figura 12.6.1.5** Possibles distribucions de tubs.

$$pitch = 1,25 \cdot D_{ext\ tub} = 170mm$$

- Càlcul del diàmetre de carcassa ( $D_c$ ): per calcular el diàmetre de carcassa s'ha de sumar el diàmetre del feix de tubs i l'espai entre el feix de tubs i la paret externa de la carcassa que dependrà bàsicament del tipus de carcassa utilitzada.

<b>Fixed and U-tube</b>	Tipo U/L/M/N
<b>Outside packed head</b>	Tipo P
<b>Split-ring floating head</b>	Tipo S/W
<b>Pull-trough floating head</b>	Tipo T

**Figura 12.6.1.1** Possibles tipus de carcassa.

S'escull un tipus de carcassa T ja que és la que proporciona un espai entre carcassa i feix de tubs més elevat i no està fixada podent desmuntar els tubs per al seu manteniment.

El diàmetre del feix de tubs es calcula com:

$$D_b = D_{ext} \cdot \left(\frac{N_t}{K_1}\right)^{1/n_1} = 1,30m$$

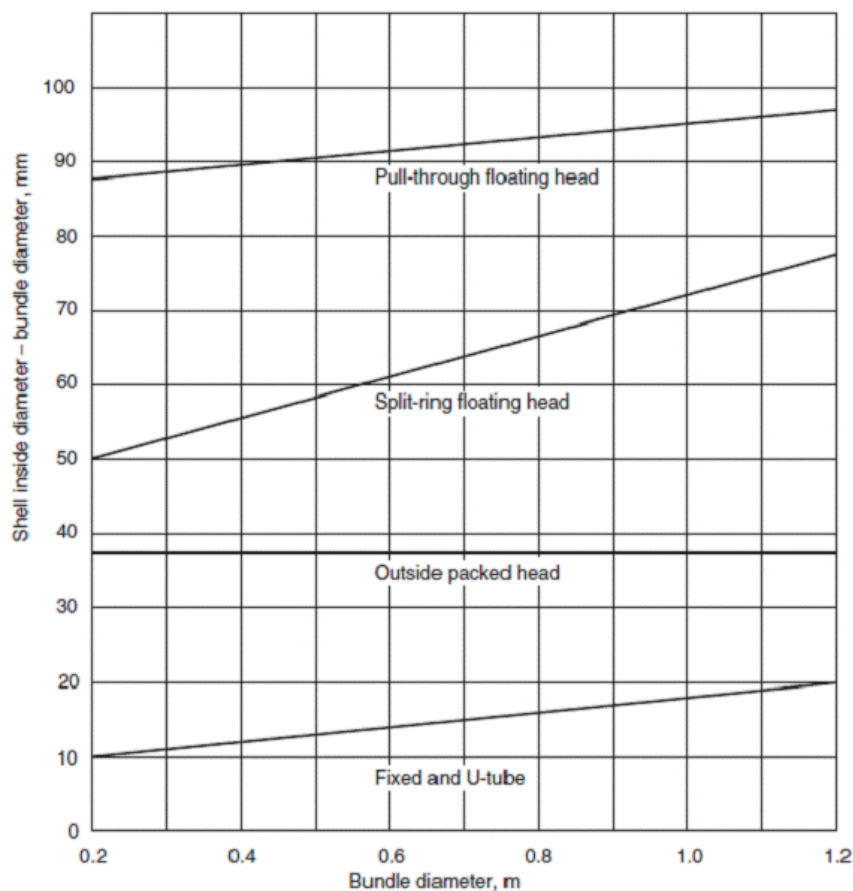
on:

- $N_t$ = numero de tubs
- $D_b$ = diàmetre del feix de tubs (mm)
- $D_{ext}$ = diàmetre exterior dels tubs (mm)
- $N_1$  i  $K_1$  son funció del pitch escollit i del número de passos per tubs segons la següent taula:

**Taula 12.6.1.6** Valors de les constants K1 i n1 per pitch triangular.

PITCH TRIANGULAR	
Passos pel tub	1
K1	0,319
n1	2,142

L'espai entre la carcassa i el feix de tubs es pot trobar gràficament amb la figura 12.6.1.7. Cal conèixer el diàmetre del feix de tubs ( $D_b$ ) i situar-lo a l'eix x, a l'eix y es trobarà la diferència del diàmetre de carcassa i del diàmetre del feix de tubs ( $D_s - D_b$ ).

**Figura 12.6.1.2** Distància entre carcassa i feix de tubs.

El diàmetre de carcassa finalment és:

$$D_s = \text{valor de l'eix y} + D_b = 1,40 \text{ m}$$

- Càlcul del numero de pantalles deflectores i separació entre elles: les pantalles deflectores compleixen dos funcions principals:

- a. Serveixen de suport als tubs en la posició adequada durant el seu muntatge i operació, i a més a més prevenen vibracions dels tubs causats pel flux de toluè.
- b. Serveixen de guia pel toluè, a través dels tubs, incrementant la velocitat i el coeficient de transferència de calor.

Hi ha dos paràmetres que determinen les característiques geomètriques de les pantalles deflectores:

1. L'altura lliure de la pantalla (*baffle cut*), espai que queda entre pantalla i carcassa per on passa el fluid. Correspon a un percentatge entre el 15 i el 45% del diàmetre de carcassa, com a valor òptim s'agafa un 25%.

$$baffle\ cut = 0,25 \cdot 1,40m = 0,35\ m$$

2. Espai entre pantalles ( $I_B$ ) que pren un valor entre 0,2 i 1 vegades el diàmetre de carcassa agafant com a número òptim 0,4.

$$I_B = 0,4 \cdot 1,4 = 0,56\ m$$

El número de pantalles deflectores es pot calcular com:

$$N^{\circ}\ pantalles\ deflectores = \frac{L}{I_B} - 1 = \frac{2}{0,56} - 1 = 2,57$$

$$N^{\circ}\ pantalles\ deflectores = 3$$

- Espessor de la carcassa. Càlcul a pressió interna

$$espessor\ de\ carcassa = \frac{P \cdot R_{int}}{S \cdot E - 0,6 \cdot P} + C.A \quad \text{Equació 12.6.1.20}$$

on:

- P = pressió de disseny del recipient (bar) = 3,03
- $R_{int}$  = radi intern (mm) = 840
- E = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)
- S = càrrega admissible del material (bar) = 7583,40 bar
- C.A = sobreesspessor (mm)

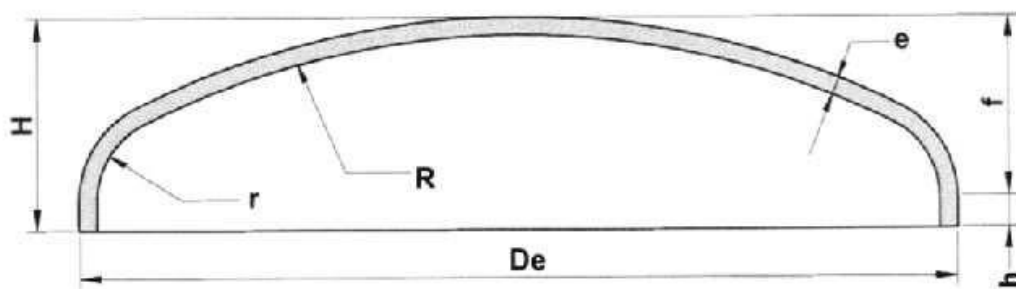


La tolerància de fabricació per aquest cas, un cilindre, és nul·la, el sobre espessor per corrosió del material és de 0,508mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobreesspessor serà 7,62 mm.

El valor obtingut és de 0,32 mm i tenint en compte el sobreesspessor escollit l'espessor de la carcassa serà de 7,94 mm i per tal d'evitar costos de fabricació específics s'utilitzarà un valor de:

$$\text{espessor de carcassa} = 10\text{mm}$$

- Espessor dels capçals. Càlcul a pressió interna Els tipus de capçals més utilitzats són el toriesfèric, l'hemisfèric i l'el·lipsoïdal, en aquest cas s'utilitza el toriesfèric ja que és el més comú en la indústria química.



**Figura 12.6.1.8** Esquema de les dimensions d'un capçal tipus toriesfèric.

Aquest capçal ve definit pel radi de la corona (R) i el radi del colze (r) que es calculen respecte al diàmetre de la carcassa.

$$R = D \text{ intern} = 1400\text{mm}$$

$$r = 0,1 \cdot D = 140 \text{ mm}$$

$$\frac{R}{r} = 10$$

Per una relació L/r menor de 16 l'espessor es calcula amb l'expressió següent:

$$\text{espessor capçal} = \frac{P \cdot R \cdot M}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad \text{Equació 12.6.1.21}$$

on:

- P = pressió de disseny del recipient (bar) = 3,03
- M = factor que depèn de la relació R/r, en aquest cas igual a 1,54

- E = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)
- S = càrrega admissible del material (bar) = 7583,40 bar
- C<sub>1</sub> = marge per corrosió (mm) = 7,62
- C<sub>2</sub> = tolerància de fabricació (mm) = 10% de l'espessor.

Finalment el valor de l'espessor dels fondos, evitant costos de fabricació:

$$\text{espessor dels fondos} = 10\text{mm}$$

- Alçada de l'equip: a continuació es defineixen les dimensions relacionades amb l'alçada dels capçals: H, h i f i es calcula l'alçada real de l'equip.

$$h = 3,5 \cdot t_f = 35\text{mm}$$

$$f = 0,1955 \cdot D_e - 0,455 \cdot t_f = 273\text{mm}$$

$$H = h + f = 308\text{mm}$$

L'alçada total de l'equip serà doncs:

$$\text{Alçada total} = \text{Alçada cos} + (2 \cdot H) = 2,62\text{m}$$

- Espessor de la placa tubular

$$t_p = \frac{D_s}{2} \cdot \sqrt{\frac{P_c}{S}} \quad \text{Equació 12.6.1.22}$$

on:

- t<sub>p</sub> = espessor de la placa tubular (mm)
- P<sub>c</sub> = pressió de disseny de carcassa (bar) = 3,03
- D<sub>s</sub> = diàmetre de la carcassa (mm) = 1400
- S = càrrega admissible del material (bar) = 7583,40 bar

Com en el cas anterior cal sumar un 10% d'espessor per defectes de fabricació i 7,62mm per l'efecte de la corrosió i seleccionar un espessor que no suposi un cost extra de fabricació, s'obté finalment:

$$\text{espessor de la placa tubular} = 22\text{mm}$$

- Volum de l'equip: El volum de l'equip té en compte el volum de la carcassa i el volum dels fondos calculats amb les formules següents:

$$V_{carcassa} = \left(\frac{\pi}{4}\right) \cdot D_{int}^2 \cdot L \quad \text{Equació 12.6.1.23}$$

$$V_{fondo} = \left(\frac{\pi}{8}\right) \cdot 0,162 \cdot D_{int}^3 \quad \text{Equació 12.6.1.24}$$

on:

- $D_{int}$  = diàmetre intern de la carcassa (m)
- L = longitud del reactor (m)

$$V_{carcassa} = 3,08 \text{ m}^3$$

$$V_{fondo} = 0,17 \text{ m}^3$$

$$V_{equip} = V_{carcassa} + 2 \cdot V_{fondo} = 3,24 \text{ m}^3$$

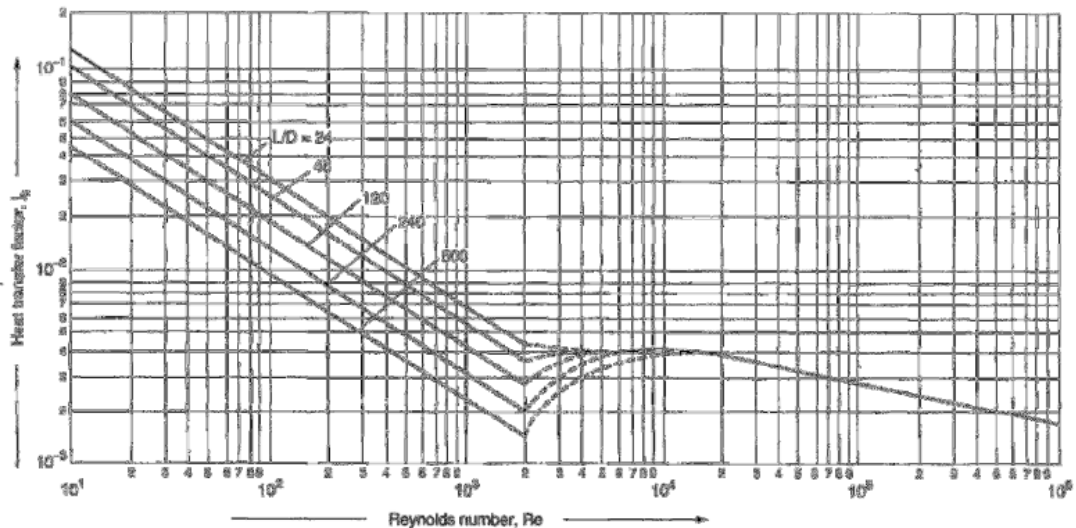
- Pèrdua de càrrega: Una vegada trobat aquests valors es calculen les pèrdues de càrrega dels fluids que circulen tant per la carcassa com pels tubs, aquestes són principalment degudes a pèrdues de fricció i a contraccions i expansions del fluid.

Pel càlcul de la pèrdua de càrrega dels tubs només es consideren les pèrdues per fricció, cal tenir en compte que per trobar la pèrdua de càrrega dels fluids que circulen pels tubs es tindrà en compte només la pèrdua de càrrega en un sol tub, aquesta es pot estimar utilitzant la següent expressió.

$$\Delta P_t = 8 \cdot j_h \cdot \frac{\rho_t \cdot v_t^2}{2} \cdot \left(\frac{L}{D_i}\right)$$

on:

- $\Delta P_t$  = pèrdua de pressió (bar)
- $j_h$  = factor de fricció, que es calcula mitjançant la figura 12.24 de Coulson (adjunta) a partir del numero de Reynolds.



**Figura 12.6.1.9** Factor de transferència de calor pel costat de tubs a partir del número de Reynolds [Coulson and Richardson's, 3rd Edition, 1999]

- $\rho_t$ = densitat del fluid de mescla ( $\text{Kg/m}^3$ )
- $v_t$ = velocitat del fluid de mescla (m/s)
- L= longitud dels tubs (m)
- $D_i$ = diàmetre intern del tub (m)

Pel càlcul del Reynolds es segueix la següent metodologia:

Càlcul de l'àrea de pas d'un tub:

$$A_{pas\ 1\ tub} = \frac{\pi}{4} \cdot D_i^2 = 0,008m^2$$

on:

- $A_{pas\ 1\ tub}$ = àrea de pas d'un tub ( $m^2$ )
- $D_i$ = diàmetre intern del tub (m)

Càlcul de l'àrea de pas de tots els tubs:

$$A_{pas\ t} = N_t \cdot \frac{A_{pas\ 1\ tub}}{n_{pt}} = 0,20m^2$$

on:

- $A_{pas\ t}$ = àrea de pas de tots els tubs ( $m^2$ )
- $N_t$ = numero de tubs
- $A_{pas\ 1\ tub}$ = àrea de pas d'un tub ( $m^2$ )

Càlcul del cabal de fluid:

$$G_{tub} = \frac{m_t}{A_{pas\ t}} = 6562,75 \text{ kg/m}^2 \cdot h$$

on:

- $G_{tub}$ = cabal del fluid per àrea (Kg/h·m2)
- $m_t$ = cabal màssic del fluid (Kg/h)
- $A_{pas\ t}$ = àrea de pas de tots els tubs (m2)

Càlcul del Reynolds:

$$Re = \frac{D_i \cdot G_{tub}}{\mu} = 8.582,06 \text{ flux TURBULENT}$$

on:

- Re= numero de Reynolds
- $D_i$ = diàmetre intern del tub (m)
- $G_{tub}$ = cabal del fluid per àrea (Kg/h·m2)
- $\mu$ = viscositat de la mescla (Kg/h·m)

Per tant gràficament el valor de  $j_h = 0,009$

Pel càlcul de la velocitat del fluid que circula pels tubs s'utilitza la següent formula:

$$v_t = \frac{m_t}{\rho_t \cdot A_{pas\ 1\ tub} \cdot N_{tp}} = 0,94 \text{ m/s}$$

on:

- $v_t$ = velocitat del fluid de mescla (m/s)
- $m_t$ = cabal màssic del fluid (Kg/s)
- $\rho_t$ = densitat del fluid de mescla (Kg/m3)
- $A_{pas\ 1\ tub}$  = àrea de pas del tub (m2)
- $N_{tp}$ = numero de tubs

Finalment el valor de la pèrdua de càrrega pel costat de tubs és igual a:

$$\Delta P_t = 8 \cdot j_h \cdot \frac{\rho_t \cdot v_t^2}{2} \cdot \left(\frac{L}{D_i}\right) = 1,21 \text{ Pa} = 1,21 \text{ N/m}^2$$

El valor màxim aconsellable per a gasos és de  $0,5\text{kN/m}^2$ , en aquest cas el valor és de  $2,1 \cdot 10^{-4} \text{ kN/m}^2$  i per tant la pèrdua de càrrega és menyspreable.

Pel càlcul de la pèrdua de càrrega de la carcassa només es consideren les pèrdues per fricció, aquestes es poden estimar utilitzant la següent expressió.

$$\Delta P_s = 8 \cdot j_F \cdot \frac{\rho_s \cdot v_s^2}{2} \cdot \left( \frac{D_s}{D_{eq}} \right) \cdot \left( \frac{L}{I_B} \right)$$

on:

- $\Delta P_s$  = pèrdua de pressió (bar)
- $j_F$  = factor de fricció, que es calcula mitjançant la figura 12.24 de Coulson a partir del numero de Reynolds.
- $\rho_s$  = densitat del toluè ( $\text{Kg/m}^3$ )
- $v_s$  = velocitat del toluè (m/s)
- $L$  = longitud de la carcassa (m)
- $D_s$  = diàmetre intern de carcassa (m)
- $D_{eq}$  = diàmetre equivalent (m)

Pel càlcul del Reynolds es segueix la següent metodologia:

Càlcul del Reynolds:

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

on:

- $Re$  = numero de Reynolds
- $D_{eq}$  = diàmetre equivalent (m)
- $G_s$  = cabal de toluè ( $\text{Kg/h} \cdot \text{m}^2$ )
- $\mu_s$  = viscositat del toluè ( $\text{Kg/h} \cdot \text{m}$ )

Càlcul del diàmetre equivalent:

$$D_{eq} = \frac{1,10}{D_E} \cdot (\text{pitch}^2 - 0,917 \cdot D_E^2) = 0,15\text{m}$$

on:

- $D_{eq}$ = diàmetre equivalent (m)
- $D_E$ = diàmetre exterior tubs (m)
- $pitch = 1,25 \cdot D_E$  = distància entre els centres de dos tubs consecutius (m)

Càlcul del cabal de toluè:

$$G_s = \frac{M_s}{A_{st}} = 39.739,88 \text{ kg/hm}^2$$

on:

- $G_s$ = cabal de toluè (Kg/h·m<sup>2</sup>)
- $M_s$ = cabal màssic de toluè (Kg/h)
- $A_{st}$ = àrea transversal de carcassa (m<sup>2</sup>)

Càlcul de l'àrea transversal de carcassa:

$$A_{st} = \frac{I_B \cdot D_s \cdot (pitch - D_E)}{pitch \cdot n_{ps}} = 0,24 \text{ m}^2$$

on:

- $A_{st}$ = àrea transversal de carcassa (m<sup>2</sup>)
- $I_B$ = espai entre pantalles (m)
- $pitch = 1,25 \cdot D_E$  = distància entre els centres de dos tubs consecutius (m)
- $D_E$  = diàmetre exterior de tubs (m)
- $n_{ps}$  = numero de passos per tubs (1)

Pel càlcul de la velocitat del toluè que circula per carcassa s'utilitzarà la següent formula:

$$v_s = \frac{M_s}{A_{st} \cdot \rho_s} = 0,013 \text{ m/s}$$

on:

- $v_s$ = velocitat del toluè (m/s)
- $M_s$ = cabal màssic de toluè (Kg/s)
- $\rho_s$ = densitat del toluè (Kg/m<sup>3</sup>)
- $A_{st}$ = àrea transversal de la carcassa (m<sup>2</sup>)

Finalment el valor del Reynolds és:

$$Re = \frac{D_{eq} \cdot G_s}{\mu_s} = 6.623,31 \text{ flux TURBULENT}$$

Li correspon un  $j_f = 0,005$ .

El valor de la pèrdua de càrrega per carcassa és de:

$$\Delta P_s = 8 \cdot j_f \cdot \frac{\rho_s \cdot v_s^2}{2} \cdot \left( \frac{D_s}{D_{eq}} \right) \cdot \left( \frac{L}{I_B} \right) = 0,09 Pa = \mathbf{0,09 N/m^2}$$

El valor màxim aconsellable per a líquids és de  $70 \text{ kN/m}^2$ , en aquest cas el valor és de  $9,2 \cdot 10^{-5} \text{ kN/m}^2$  i per tant la pèrdua de càrrega és menyspreable igual que en el cas de tubs.

- Pes de l'equip buit: El pes del material es calcula tenint en compte la carcassa i els tubs amb les equacions següents.

$$M_{carcassa} = \rho_{Hasteloy B-2} \cdot S_{carcassa \text{ int}} \cdot t \quad \text{Equació 12.6.1.25}$$

$$M_{tubs} = \rho_{Hasteloy B-2} \cdot N_{tubs} \cdot \frac{\pi}{4} \cdot (D_{ext}^2 - D_{int}^2) \cdot L_t \quad \text{Equació 12.6.1.26}$$

$$M_{capçal} = \rho_{Hasteloy B-2} \cdot S_{capçal \text{ int}} \cdot t \quad \text{Equació 12.6.1.27}$$

on:

- $M$  = pes (kg)
- $\rho_{Hasteloy B-2}$  = densitat del material =  $9220 \text{ Kg/m}^3$
- $t$  = espessor del material (m)
- $S_{carcassa \text{ intern}} = \pi \cdot Di \cdot L = 8,80 \text{ m}^2$
- $S_{capçal \text{ intern}} = 0,931 \cdot Di^2 = 1,82 \text{ m}^2$

$$M_{carcassa} = 811,36 \text{ kg}$$

$$M_{tubs} = 1274,48 \text{ kg}$$

$$M_{capçal} = 167,8 \text{ kg}$$

Es considera un 10% més de material per tal de tenir en compte soldadures, cargols, brides i similar, essent el pes final de l'equip buit:

$$M_{total} = 1,1 \cdot (M_{carcassa} + M_{tubs} + 2 \cdot M_{capçal})$$

$$M_{total} = \mathbf{2.663,58 \text{ kg}}$$



- Pes de l'equip amb aigua: El pes de l'equip en condicions de prova es pot calcular com:

$$M_{aigua} = M_{buit} + 10^3 \cdot (V_{carcassa} - V_{tubs}) \quad \text{Equació 12.6.1.28}$$

on:

- $M_{aigua}$  = pes de l'equip amb aigua (kg)
- $M_{buit}$  = pes de l'equip buit (kg)
- $V_{carcassa}$  = volum de la carcassa (m<sup>3</sup>)
- $V_{tubs} = \left(\frac{\pi}{4} \cdot D^2 \cdot L\right) \cdot N_{tubs} = 0,4m^3$

$$M_{aigua} = 5.342,34 \text{ kg}$$

- Pes del reactor en operació: Cal calcular la massa de toluè que s'utilitza per mantenir el reactor a la temperatura desitjada i sumar el pes de l'equip buit. El pes del gas que passa per tubs es considera menyspreable.

$$M_{toluè} = \rho_{toluè} \cdot (V_{carcassa} - V_{tubs}) \quad \text{Equació 12.6.1.29}$$

on:

- $\rho_{toluè}$  = densitat del toluè (818kg/m<sup>3</sup>)

$$M_{oli} = 2.191,23 \text{ kg}$$

$$M_{equip \text{ operació}} = 4.854,80 \text{ kg}$$

- Espessor de l'aïllant: tot i que la carcassa es trobi a una temperatura inferior a 60°C, tenint en compte que la reacció té lloc a una temperatura molt elevada (260°C) es decideix aïllar l'equip amb llana de roca. L'espessor d'aquest aïllant es pot calcular com:

$$X = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{\Delta T}{D_{ext}}\right)^{\frac{1}{4}}} \quad \text{Equació 12.6.1.30}$$

on:

- $X$  = espessor de l'aïllant (cm)
- $\Delta T$  = diferència de temperatura entre l'interior i l'exterior del recipient (60 - 15)°C = 45.

- $D_{ext}$  = diàmetre exterior del recipient (m)

Si es compara l'espessor calculat de l'aïllant amb el que es pot trobar en les conduccions, es decideix augmentar el valor de l'espessor a el doble per assegurar un bon aïllament.

$$X = 7 \text{ cm}$$

Aquest aïllant quedarà recobert per una capa d'alumini per tal de protegir-lo de les inclemències meteorològiques.

El volum de l'aïllant es determina per poder-ne calcular el preu amb l'expressió següent:

$$V_{aïllant} = S_{reactor\ extern} \cdot X_{aïllant} \quad \text{Equació 12.6.1.31}$$

$$S_{reactor\ extern} = S_{carcassa\ extern} + S_{capçal\ extern}$$

$$S_{reactor\ extern} = \pi \cdot De \cdot L + 0,931 \cdot De^2 = 10,8m^2$$

$$V_{aïllant} = 0,75m^3$$

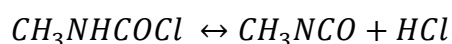
DISSENY MECÀNIC	
Material	Hasteloy B-2
Pressió de disseny (bar)	3,03
Temperatura de disseny (°C)	280
Grau de conversió (%)	100
DIMENSIONS	
Diàmetre intern carcassa (m)	1,40
Diàmetre extern carcassa (m)	1,42
Diàmetre intern tubs (m)	0,102
Diàmetre extern tubs (m)	0,118
Alçada cos (m)	2
Alçada fons superior (m)	0,308
Alçada fons inferior (m)	0,308
Alçada total (m)	1,62
Numero de tubs	25
Numero de pantalles deflectores	3

ESPESSORS	
Espessor de tubs (mm)	8
Espessor paret (mm)	8
Espessor fons superior (mm)	10
Espessor fons inferior (mm)	10
Espessor placa (mm)	22
PES	
Equip buit (Kg)	2.663
Equip en operació (Kg)	4.854

## 12.6.2 Reactor pirolític de formació de MIC

### 12.6.2.1 Introducció

La reacció de formació de MIC consisteix en la deshidrocloració de l'MCC que té lloc quan aquest es descompon per temperatura en un reactor pirolític segons la següent reacció:



La piròlisis es pot definir com la descomposició tèrmica en absència d'oxigen o qualsevol altre reactiu. Aquesta descomposició es produeix a través d'una sèrie de reaccions químiques complexes amb processos de transferència de matèria i energia. En el cas de la reacció de formació de MIC, aquesta degradació tèrmica dona lloc a la deshidrocloració de l'MCC, o el que és el mateix, a la pèrdua d'HCl de la molècula.

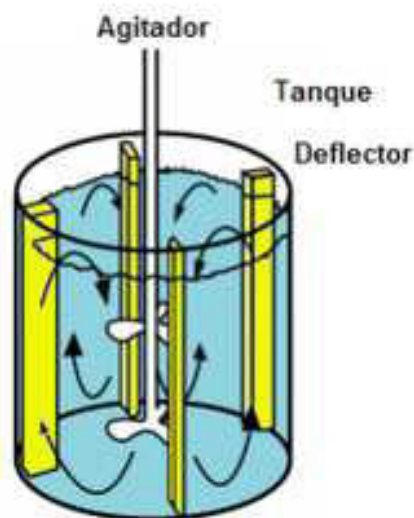
El procés de piròlisis és normalment entrés com un procés a temperatures molt elevades (properes als 500°C) en el qual un sòlid, normalment orgànic i biodegradable, es descompon emetent gasos (potencialment energètics) i cendres com a residus. D'aquesta manera perd la major part del seu pes degut al trencament d'enllaços químics i l'evaporació dels compostos volàtils.

Seguint aquests pretextos no es podria considerar la formació de MIC una piròlisis en la seva definició, però és tractada com a tal partint de la base de que es dona la descomposició d'un component orgànic per temperatura produint-se gasos (MIC i HCl) en absència d'oxigen.

En aquest cas no es produeixen cendres ja que els reactius estan en forma líquida.

Els reactors pirolítics són normalment de grans dimensions i elevats temps de residència per tal de garantir que la major part del seu contingut assoleixi la temperatura necessària per a descompondre's.

El reactor per a la formació de MIC seguirà el model d'un RCTA agitat encamisat similar al que es presenta en la figura 12.6.2.1.



**Figura 12.6.2.1** Esquema simplificat d'un RCTA similar al que s'utilitzarà en la formació de MIC.

### 12.6.2.2 Balanç de matèria

Fer el balanç de matèria en el reactor és el primer pas per tal de fer-ne el disseny, d'aquesta manera es coneixen els cabals d'entrada i de sortida del sistema així com la seva composició i es pot comprovar com el cabal màssic es conserva segons l'equació següent:

$$E + G = S + A \quad \text{Equació 12.6.2.1}$$

Els termes de l'equació es defineixen com:

- **ENTRADA (E):** El corrent d'entrada està format principalment pel reactiu, MCC, dissolt en toluè i una petita part d'HCl.

L'HCl es produeix en la mateixa piròlisis, en forma de gas, juntament amb el MIC i s'elimina en els condensadors C-401 i C-402 abans de que el corrent amb toluè i MCC

no reaccionat siguin recirculats de nou al reactor. La part d'HCl que entrarà doncs a piròlisis és la que no hagi estat separada en dits condensadors.

$$\mathbf{Entrada R2 = M_{MCC} + M_{toluè} + M_{HCl}}$$

on:

- MCC que entra al reactor format per :
  - a. Corrent de cues de la torre de recuperació de foscè (TD-302).
  - b. Corrent de cues del condensador C-402.
  - c. Corrent de cues de la torre de refinat de MIC (TD-401).

$$M_{MCC} = 1058,24\text{kg/h}$$

- Toluè que entra al reactor format per :
  - a. Corrent de cues de la torre de recuperació de foscè (TD-302).
  - b. Corrent de cues del condensador C-402.
  - c. Corrent de cues de la torre de refinat de MIC (TD-401).

$$M_{Toluè} = 3289,41\text{kg/h}$$

- HCl que entra al reactor : Corrent de cues del condensador C-402.

$$M_{HCl} = 2,60\text{kg/h}$$

$$\mathbf{Entrada R2 = 4.350,24\text{kg/h}}$$

- **GENERACIÓ (G):** Normalment la generació ve definida per la velocitat de reacció però en aquest cas la seva equació és desconeguda. El que si que es coneix és el grau de conversió, 80%, i amb aquesta dada i l'entrada de MCC és calcula la generació de MIC i HCl (productes).

$$\mathbf{Generació R2 = M_{MIC} + M_{HCl} \text{ Equació 12.6.2.3}}$$

on:

$$M_{MIC} = N_{MCC} \cdot 80\% \cdot PM_{MIC} \text{ Equació 12.6.2.3}$$

- $N_{MCC}$  = cabal molar de MCC a l'entrada (kmol/h)
- $PM_{MIC}$  = mes molecular de l'MIC (kg/kmol)

$$M_{MIC} = \frac{11,19 \text{ kmol}}{h} \cdot 80\% \cdot \frac{57,05 \text{ kg}}{\text{kmol}} = 510,90 \text{ kg/h}$$

$$M_{HCl} = N_{MCC} \cdot 80\% \cdot PM_{HCl} \quad \text{Equació 12.6.2.4}$$

- $N_{MCC}$  = cabal molar de MCC a l'entrada (kmol/h)
- $PM_{HCl}$  = mes molecular de l'HCl (kg/kmol)

$$M_{HCl} = \frac{11,19 \text{ kmol}}{h} \cdot 80\% \cdot \frac{36,46 \text{ kg}}{\text{kmol}} = 326,51 \text{ kg/h}$$

$$\text{Generació R2} = 510,90 \frac{\text{kg}}{h} + 326,51 \frac{\text{kg}}{h} = \mathbf{937,42 \text{ kg/h}}$$

- **SORTIDA (S):** Aquest reactor compta amb dues sortides, una de gas i una de líquid. La sortida gasosa està formada pels gasos productes de la reacció, MIC i HCl, i per part de MCC i toluè que surten, en estat líquid, arrossegats pels mateixos. Per altra banda la sortida de líquid conté el dissolvent, toluè, la part de MCC que no ha reaccionat, un 20%, i part d'HCl gas en dissolució.

$$\text{Sortida R2 gasosa} = M_{MIC} + M_{HCl} + M_{Toluè} + M_{MCC} \quad \text{Equació 12.6.2.5}$$

on:

$$M_{MIC} = \text{MIC generat} = \mathbf{510,90 \text{ kg/h}}$$

$$M_{HCl} = \text{HCl generat} - \text{HCl dissolt (3\% del generat)} = 319,24 \text{ kg/h}$$

$$M_{Toluè} = \text{Toluè arrossegat (30\% del que entra)} = 986,82 \text{ kg/h}$$

$$M_{MCC} = \text{MCC arrossegat (42\% del 20\% que no reacciona)} = 87,93 \text{ kg/h}$$

$$\text{Sortida R2 gasosa} = \mathbf{1.904,87 \text{ kg/h}}$$

$$\text{Sortida R2 líquida} = M_{HCl} + M_{Toluè} + M_{MCC} \quad \text{Equació 12.6.2.6}$$

on:

$$M_{HCl} = \text{HCl dissolt (3\% del generat)} = 9,873 \text{ kg/h}$$

$$M_{Toluè} = \text{Toluè no arrossegat (70\% del que entra)} = 2.302,59 \text{ kg/h}$$

$$M_{MCC} = \text{MCC no arrossegat (58\% del 20\% no reaccionat)} = 121,42 \text{ kg/h}$$

$$\text{Sortida R2 líquida} = 2.433,88 \text{ kg/h}$$

$$\text{Sortida R2 TOTAL} = 4.350,24 \text{ kg/h}$$

- **ACUMULACIÓ (A):** En aquest cas es treballa en estat estacionari i per tant el terme d'acumulació és igual a zero.

$$\text{Acumulació R2} = 0,00 \text{ kg/h}$$

Les taules següents recullen els resultats d'aquest balanç així com algunes de les seves propietats i les condicions d'operació del reactor.

*Taula 12.6.2.2 Cabals màssics d'entrada i sortida del reactor de formació de MIC.*

COMPONENT	Cabal d'ENTRADA (kg/h)	Cabal de SORTIDA(kg/h)
MIC	-	510,90
MCC	1058,24	209,35
ÀCID CLORHÍDRIC	2,59	329,11
TOLUÈ	3289,41	3.289,41
<b>TOTAL</b>	<b>4.350,24</b>	<b>4.350,24</b>

*Taula 12.6.1.3 Condicions d'operació i grau de conversió en el reactor de formació de MIC.*

Temperatura d'operació (°C)	97
Pressió d'operació (atm)	1
Grau de conversió respecte MCC (%)	80

*Taula 12.6.1.4 Propietats dels corrents d'entrada i de sortida del reactor de formació de MIC*

	PROPIETATS DEL FLUID		
	ENTRADA	SORTIDA GAS	SORTIDA LÍQUID
Densitat (kg/m <sup>3</sup> )	779,19	447,48	792,71
Viscositat (cP)	0,25	0,14	0,25
Cp (J/mol·K)	160,98	86,99	155,85

Coneixent el cabal màssic total que entra al reactor i la densitat de la mescla es pot obtenir el valor del cabal volumètric d'entrada amb l'equació 12.6.2.7, aquest cabal serà utilitzat més endavant pel càlcul del volum del reactor :

$$Ql \text{ volumètric} = \frac{Ql_{\text{màssic}}}{\rho_{\text{mescla}}} \quad \text{Equació 12.6.2.7}$$

$$Ql \text{ volumètric} = \frac{4.350,24 \text{ kg/h}}{779,19 \text{ kg/m}^3} = 5,57 \text{ m}^3/\text{h}$$

### 12.6.2.3 Balanç d'energia

Juntament amb el balanç de matèria és imprescindible realitzar el balanç d'energia del reactor. La formació de MIC és una reacció endotèrmica amb la qual cosa necessita energia per produir-se. La reacció té lloc a 97°C i el reactor es escalfat mitjançant una resistència.

El primer pas per al disseny del sistema d'escalfament és conèixer la calor que cal aportar, l'entrada al reactor té una temperatura molt propera a la d'operació, per tant es considera que tant sols cal aportar l'energia de reacció i aquesta es calcula a partir de les entalpies de formació de les espècies que intervenen en la reacció a la temperatura d'operació amb la fórmula 12.6.2.4:

**Taula 12.6.1.4** Entalpies de formació a 97°C per les espècies que participen a la reacció de formació de MIC.

	$\Delta H$ formació a 97°C (kJ/kmol)
MIC	-58.000,00
MCC	-158.000,00
HCl	-95.400,00

$$\Delta H_{\text{reacció}} = \sum (n_j \cdot \Delta H_{\text{formació},j}) \text{ productes} - \sum (n_j \cdot \Delta H_{\text{formació},j}) \text{ reactius} \quad \text{Equació 12.6.2.8}$$

on:

- j = espècies que intervenen en la reacció.
- $\Delta H_{\text{reacció}}$  = entalpia de reacció (J/mol)
- n = mols de component j formats
- $\Delta H_{\text{formació}}$  = entalpia de formació (J/mol) calculada com:

$$\Delta H_{\text{formació}} = \Delta H_{\text{formació}}^0 + C_p(T_{\text{operació}} - T_{\text{ref}}) \quad \text{Equació 12.6.2.9}$$

on:

- $\Delta H_{\text{formació}}^0$  = entalpia estàndard de formació (298K)(J/mol)
- $C_p$  = capacitat calorífica (J/mol·K). Considerada constant amb la temperatura però diferent quan la substància es troba en estat líquid o gasós.



- $T_{operació}$  = temperatura a la que es dona la reacció (K).
- $T_{referència}$  = 298K

$$\Delta H_{reacció} \mathbf{4.630,00 \text{ kJ/kmol}}$$

La calor que cal aportar a la reacció per tal de que es formin els mols de MIC de la reacció és igual a:

$$Q = N_{MIC} \cdot \Delta H_{reacció} \quad \text{Equació 12.6.2.8}$$

$$Q = 8,96 \text{ kmols/h} \cdot \left( 4,63 \cdot \frac{10^6 \text{ J}}{\text{kmol}} \right) = \mathbf{41.500,00 \text{ kJ/h}}$$

#### 12.6.2.4 Disseny funcional

El disseny funcional del reactor permetrà conèixer el seu volum segons l'equació 12.6.2.11 el cabal d'entrada s'ha calculat en l'apartat del balanç de matèria i el temps de residència és conegut (21h).

Tenint en compte que en el reactor es formen gasos i el volum es calcula amb el cabal d'entrada, tot en forma de líquid, s'aplica un factor de seguretat del 20% fent el reactor més gran per tal d'assegurar que els gasos no creen sobrepressió en l'interior. (idealment els gasos s'extreuen de forma instantània i no apareix sobrepressió, però a la realitat això no és possible al 100%).

Per altra banda, s'ha aplicat un factor de seguretat per al sobredimensionament dels reactors del 35% ja que la cinètica és desconeguda i les dades per al disseny no s'han pogut comprovar de forma empírica.

$$V = Ql \cdot \tau \quad \text{Equació 12.6.2.11}$$

on:

- $\tau$  = temps de residència (hores)
- $V$  = volum del reactor ( $\text{m}^3$ )
- $Ql$  = cabal d'entrada al reactor ( $\text{m}^3/\text{h}$ )

$$V = 5,57 \frac{\text{m}^3}{\text{h}} \cdot 21\text{h} \cdot 1,2 \cdot 1,35 = \mathbf{189,42 \text{ m}^3}$$

Veient que es tracta d'un volum elevat es decideix dividir-lo en dos equips iguals que treballaran de forma simultània.

Agafant un valor d'alçada normalitzat i una relació alçada-diàmetre (L/D) de 2, les dimensions dels reactors són:

$$\text{Alçada} = 8 \text{ m}$$

$$\text{Diàmetre} = 4 \text{ m}$$

$$\text{Volum d'un reactor} = 100 \text{ m}^3$$

$$\text{Volum TOTAL} = 200 \text{ m}^3$$

Els reactors contaràn amb un sistema d'agitació per tal d'homogeneïtzar el seu contingut i una resistència tèrmica encarregada d'aportar la calor de reacció necessària.

Per últim, es comprova com l'àrea de la que disposa cadascun dels aparells és més que suficient pel bescanvi energètic:

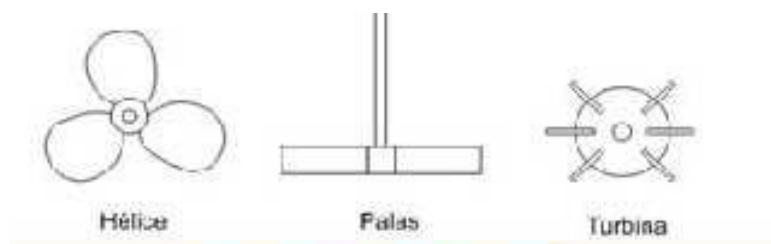
$$\text{Àrea} = \pi \cdot D \cdot L \quad \text{Equació 12.6.2.12}$$

$$\text{Àrea} = \pi \cdot 4\text{m} \cdot 8\text{m} = 100 \text{ m}^2$$

### 12.6.2.5 Agitació

El reactor de formació de MIC és un RCTA i requereix la instal·lació d'un sistema d'agitació per tal de mantenir el seu contingut homogeneïtzat.

Els tipus principals d'agitadors utilitzats en la indústria són, d'hèlix, de paletes i de turbina, en el cas del reactor de piròlisis es decideix utilitzar un agitador d'hèlix.



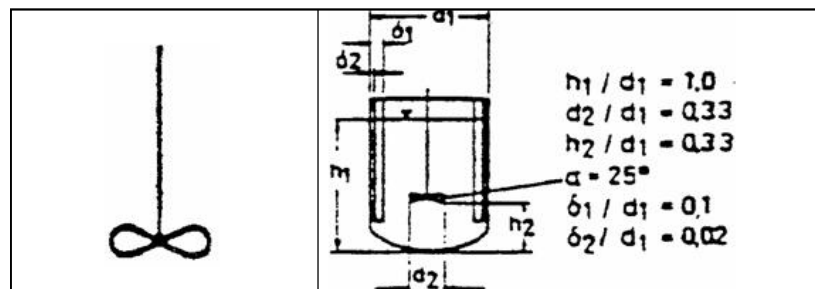
**Figura 12.6.2.2** Tipus d'agitadors més utilitzats en la indústria química.

Aquests agitadors produeixen un flux axial que opera a una velocitat elevada i és adequat per a líquids poc viscosos com el de la mescla de reacció ( $\mu = 0,25\text{cP}$ ).

Degut a la persistència dels corrents de flux, els agitadors d'hèlix són eficaços per tancs de grans dimensions (tanc de reacció =  $100\text{m}^3$ ).

Cal tenir en compte que no interessa que el producte, en forma de gas, i el contingut líquid del reactor es barregin, així que l'agitador de turbina és descartat tenint en compte que provoca el trencament de les bombolles de gas augmentant la superfície de contacte gas-líquid i afavorint-ne la mescla.

Un cop escollit el tipus d'agitador es calculen les seves dimensions tenint en compte les relacions geomètriques de la figura 12.6.2.3.



**Figura 12.6.2.3** Relacions geomètriques d'un agitador d'hèlix.

Relacions geomètriques:

$$h_1/d_1 = 1,0$$

$$d_2/d_1 = 0,33$$

$$h_2/d_1 = 0,33$$

$$\delta_1/d_1 = 0,1$$

$$\delta_2/d_1 = 0,02$$

on:

- $h_1$  = alçada de líquid (m).
- $d_1$  = diàmetre intern del reactor (m).
- $d_2$  = diàmetre de l'agitador (m).
- $h_2$  = alçada des de la hèlix fins el fons del reactor (m).
- $\delta_1$  = amplada de les pales deflectores (m).
- $\delta_2$  = distància entre la paret del reactor i la placa deflector (m).

$$h_1 = 4,00 \text{ m}$$

$$d_1 = 4,00 \text{ m}$$

$$d_2 = 1,32 \text{ m}$$

$$h_2 = 1,32 \text{ m}$$

$$\delta_1 = 0,40 \text{ m}$$

$$\delta_2 = 0,080 \text{ m}$$

Es col·loquen 4 plaques deflectores, valor estàndard, per evitar la formació de remolins en el reactor.

La potència que tindrà l'agitador es pot calcular a partir del Reynolds d'agitació amb l'equació següent:

$$Re = \frac{\rho \cdot n \cdot Da^2}{\mu}$$

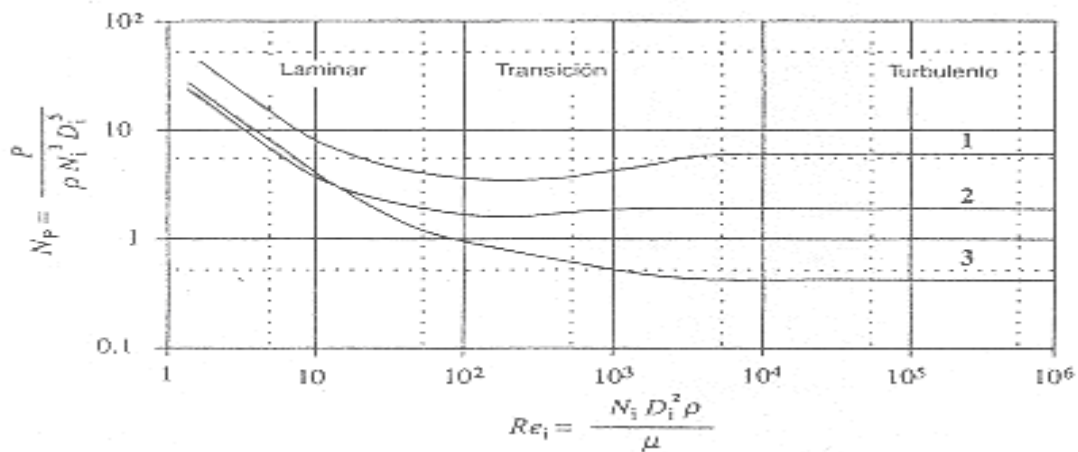
on:

- $\rho$  = densitat de la mescla. S'escull el valor més alt entre l'entrada i la sortida tenint en compte que serà el més conservatiu, 792,71 kg/m<sup>3</sup>.
- $n$  = revolucions de l'agitador (rpm), s'ha escollit un valor de 5rpm.
- $Da$  = diàmetre de l'agitador (1,32m).
- $\mu$  = viscositat de la mescla ( $2,5 \cdot 10^{-4}$  kg/m·s).

$$Re = \frac{792,71 \text{ kg/m}^3 \cdot 5 \text{ rps} \cdot 1,32^2 \text{ m}}{2,5 \cdot \frac{10^{-4} \text{ kg}}{\text{m}} \cdot \text{s}} = 27.624.358$$

Amb el Reynolds es pot conèixer el valor del número de potència (Np) que permetrà saber quina potència requereix l'agitador del reactor.

Per valors de Reynolds superiors a 10.000 Np agafa un valor constant. Consultant la figura 12.6.2.4 Np és igual a 0,4.



**Figura 12.6.2.4** Relació nombre de Reynolds nombre  $N_p$ . Línia 3 corresponent a agitador d'hèlix.

La potència de l'agitador serà doncs:

$$P = \frac{N_p \cdot D a^5 \cdot n^3 \cdot \rho}{g \cdot 1000} = 16 \text{ kW}$$

#### 12.6.2.6 Intercanvi de calor

Amb balanç d'energia s'ha calculat l'energia que cal aportar al reactor per tal de que aquest mantingui una temperatura constant de 97°C.

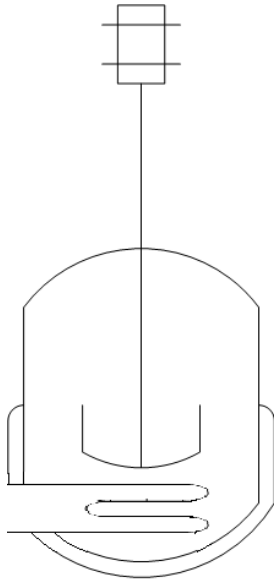
Tenint en compte que els productes entren a una temperatura molt propera a la d'operació, es decideix instal·lar una resistència per escalfar el reactor evitant així l'ús d'una camisa externa, una mitja canya o un serpenti que en complicarien l'operació i el manteniment.

Aquesta resistència se situa a la part inferior del tanc de reacció, per sota de l'agitador, a 0,5m del fons inferior i a 0,75m de l'agitador aproximadament, assegurant d'aquesta manera que cap dels dos aparells s'afecten mútuament.

La potència requerida per la resistència és de 12kW, equivalent als 11,50 kJ/s que requereix el reactor per mantenir la temperatura d'operació establerta.

A més de la resistència es col·locarà una capa d'aïllant tèrmic de llana de roca que cobreixi el reactor fins a l'alçada de líquid per evitar al màxim pèrdues de calor.

A la figura 12.6.2.5 es pot veure un esquema simplificat d'aquest reactor amb el sistema d'agitació, la resistència i la capa d'aïllant corresponents.



**Figura 12.6.2.5** Esquema simplificat del reactor de formació de MIC, amb sistema d'agitació, resistència i aïllament tèrmic.

### 12.6.2.7 Disseny mecànic

El disseny mecànic del reactor es realitza seguint el codi ASME per al disseny d'equips a pressió.

En primer lloc a partir de les condicions d'operació es defineixen la pressió i la temperatura de disseny i es decideix el material del que es farà el reactor tenint en compte les característiques dels fluids que hi circulen.

- **Pressió de disseny:** la pressió de disseny es calcula aplicant la norma següent:

$$\text{Pressió de disseny} = \max (1,1 \cdot (P_{op} + \rho \cdot g \cdot h), (P_{op} + \rho \cdot g \cdot h) + 2atm)$$

on:

- $\rho$  = densitat del líquid ( $\text{kg/m}^3$ ).
- $g$  = gravetat ( $9,8\text{m/s}^2$ ).
- $h$  = alçada de líquid (m) calculada com:

$$V - V_{fons inferior} = \frac{\pi}{4} \cdot D^2 \cdot h \quad \text{Equació 12.6.2.15}$$

on:

- $V$  = volum útil de reactor ( $116,93/2$  reactors =  $58,465\text{m}^3$ ).
- $V_{fons inferior}$  calculat com:  

$$V_{fondo} = \left(\frac{\pi}{8}\right) \cdot 0,162 \cdot D_{int}^3 = 4,07\text{m}^3$$
- $D$  = diàmetre intern del reactor (4m).

$$h = 4,32 \text{ m}$$

- Terme ( $\rho \cdot g \cdot h$ ) = 33560,17 Pa = 0,33 atm

$$\textbf{Pressió de disseny} = \max(1,46\text{atm}, 3,33\text{atm}) = \textbf{3,33atm}$$

- Temperatura de disseny: la temperatura de disseny s'estableix 20°C per sobre de la temperatura d'operació del reactor:

$$\textbf{Temperatura de disseny} = (97^\circ\text{C} + 20^\circ\text{C}) = \textbf{117^\circ\text{C}}$$

- Material: Per decidir quin és el millor material per aquest reactor cal tenir en compte que es treballa amb HCl i la corrosió que aquest produeix és elevada, consultant la taula de la figura 12.6.2.6 s'escull Hasteloy B-2 amb una corrosió menor de 0,508mm/any.

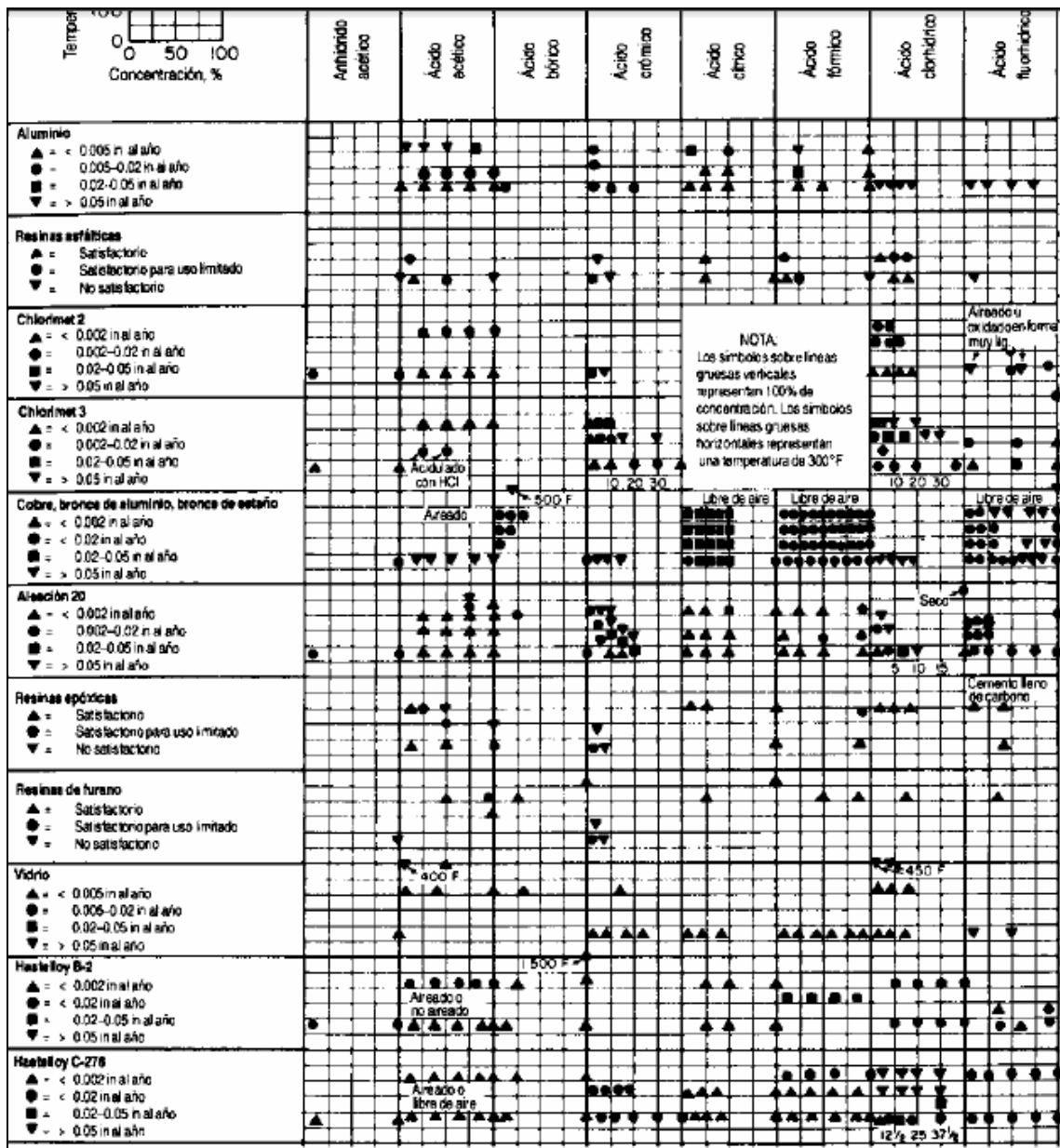


Figura 12.6.2.5 Dades detallades de corrosió en materials de construcció [Perry's Handbook]

Amb les condicions de disseny definides es pot començar amb el disseny aplicant la normativa ASME.

- Espesor del cilíndrie. Càlcul a pressió interna: L'espessor del cos cilíndric es calcula amb l'expressió següent:

$$t_c = \frac{P \cdot R_{int}}{S \cdot E - 0,6 \cdot P} + C \cdot A \quad \text{Equació 12.6.2.9}$$



on:

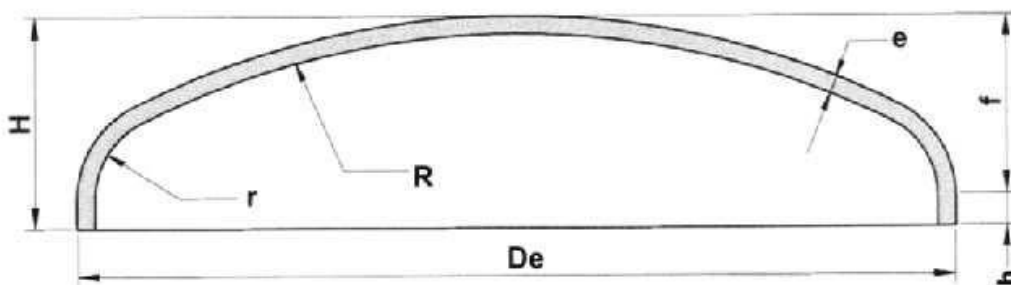
- $t_c$  = espessor del cilindre (mm)
- $P$  = pressió de disseny del recipient (bar) = 3,36
- $R_{int}$  = radi intern (mm) = 2000
- $E$  = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)
- $S$  = càrrega admissible del material (bar) = 7583,40 bar
- $C.A$  = sobreessessor (mm)

La tolerància de fabricació per aquest cas, un cilindre, és nul·la, el sobre essessor per corrosió del material és de 0,508mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobreessessor serà 7,62 mm.

El valor de  $t_c$  obtingut és de 8,65mm, aquest es sobredimenciona un 10% i per tal d'evitar costos de fabricació específics s'utilitza un valor de:

$$\text{espessor de carcassa} = 10\text{mm}$$

- Espessor dels capçals. Càlcul a pressió interna: Els tipus de capçals més utilitzats són el toriesfèric, l'hemisfèric i l'el·lipsoïdal, en aquest cas s'utilitza el toriesfèric ja que és el més comú en la indústria química.



**Figura 12.6.2.6** Esquema de les dimensions d'un capçal tipus toriesfèric.

Aquest capçal ve definit pel radi de la corona (R) i el radi del colze (r) que es calculen respecte al diàmetre intern de la carcassa:

$$R = D = 4000\text{mm}$$

$$r = 0,1 \cdot D = 400 \text{ mm}$$

$$\frac{R}{r} = 10$$

Per una relació R/r menor de 16,67 l'espessor es calcula amb l'expressió següent:

$$t_f = \frac{P \cdot R \cdot M}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad \text{Equació 12.6.2.17}$$

on:

- $t_f$  = espessor del capçal (mm)
- P = pressió de disseny del recipient (bar) = 3,36
- M = factor que depèn de la relació R/r, en aquest cas igual a 1,54
- E = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)
- S = càrrega admissible del material (bar) = 7583,40 bar
- $C_1$  = marge per corrosió (mm) = 7,62
- $C_2$  = tolerància de fabricació (mm) = 10% de l'espessor.

Finalment el valor de l'espessor dels capçals, evitant costos de fabricació específics:

$$\text{espessor dels capçals} = 10\text{mm}$$

- Alçada de l'equip: a continuació es definiran les dimensions relacionades amb l'alçada dels capçals: H, h i f i es calcularà l'alçada real de l'equip.

$$h = 3,5 \cdot t_f = 35\text{mm}$$

$$f = 0,1955 \cdot D_e - 0,455 \cdot t_f = 781\text{mm}$$

$$H = h + f = 816\text{mm}$$

L'alçada total de l'equip serà doncs:

$$\text{Alçada total} = \text{Alçada cos} + (2 \cdot H) = 9,63\text{m}$$

- Volum intern de l'equip: el volum intern de l'equip té en compte el volum de la carcassa i el volum dels capçals calculats amb les formules següents:

$$V_{\text{carcassa}} = \left(\frac{\pi}{4}\right) \cdot D_{\text{int}}^2 \cdot L \quad \text{Equació 12.6.2.18}$$

$$V_{\text{fondo}} = \left(\frac{\pi}{8}\right) \cdot 0,162 \cdot D_{\text{int}}^3 \quad \text{Equació 12.6.2.19}$$

on:

- $D_{\text{int}}$  = diàmetre intern de la carcassa (4m)
- L = longitud del reactor (8m)

$$V_{carcassa} = 100 \text{ m}^3$$

$$V_{fondo} = 4 \text{ m}^3$$

$$V_{equip} = V_{carcassa} + 2 \cdot V_{fondo} = 108 \text{ m}^3$$

- Pes de l'equip buit: el càlcul es realitza tenint en compte la densitat del material i el volum de la paret de l'equip calculat com la diferència entre el volum intern i l'extern, per tal de fer-ne les proves d'estanqueïtat.

$$V_{intern} = 108 \text{ m}^3$$

$$V_{extern carcassa} = \left(\frac{\pi}{4}\right) \cdot D_{ext}^2 \cdot L \quad \text{Equació 12.6.2.20}$$

$$V_{extern fondo} = \left(\frac{\pi}{8}\right) \cdot 0,162 \cdot D_{ext}^3 \quad \text{Equació 12.6.2.21}$$

$$V_{extern carcassa} = 102 \text{ m}^3$$

$$V_{extern fondo} = 4,13 \text{ m}^3$$

$$V_{extern} = V_{carcassa} + 2 \cdot V_{fondo} = 109,80 \text{ m}^3$$

$$Volum \text{ material} = Volum \text{ extern} - Volum \text{ intern} = 1,80 \text{ m}^3$$

$$Pes \text{ equip buit} = \rho_{HASTELOY B-2} \cdot Volum \text{ material} \quad \text{Equació 12.6.2.22}$$

- $\rho_{HASTELOY B-2} = 9220 \text{ Kg/m}^3$

Es considera un 10% més de material per la carcassa per tal de tenir en compte soldadures, cargols, brides i similar, essent el pes final de l'equip buit:

$$Pes \text{ equip buit} = 16.596 \text{ kg}$$

- Pes de l'equip amb aigua: El pes de l'equip en condicions de prova es calcula com:

$$Pes \text{ amb aigua} = Pes \text{ buit} + 10^3 \cdot V_{reactor} \quad \text{Equació 10}$$

$$Pes \text{ amb aigua} = 124.596 \text{ kg}$$

- Pes del reactor en operació: es té en compte el pes de l'equip buit i el pes de líquid que conté. Es menysprea el pes dels gasos que es produeixen.

$$Pes \text{ en operació} = Pes \text{ buit} + \rho_{líquid} \cdot V_{líquid}$$

$$\mathbf{Pes\ en\ operació = 107.705kg}$$

- Espessor de l'aïllant: degut a que la temperatura d'operació de l'equip és superior a 60°C (97°C) cal aïllar l'equip amb llana de roca. L'espessor d'aquest aïllant es pot calcular com:

$$X = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{\Delta T}{D_{ext}}\right)^{\frac{1}{4}}} \quad \text{Equació 12.6.2.23}$$

on:

- X = espessor de l'aïllant (cm)
- $\Delta T$  = diferència de temperatura entre l'interior i l'exterior del recipient (97 - 15)°C = 82.
- $D_{ext}$  = diàmetre exterior del recipient (m)

Si es compara l'espessor calculat de l'aïllant amb el que es pot trobar en les conduccions, es decideix augmentar el valor de l'espessor a el doble per assegurar un bon aïllament.

$$\mathbf{X = 7,84\ cm}$$

Aquest aïllant quedarà recobert per una capa d'alumini per tal de protegir-lo de les inclemències meteorològiques.

El volum de l'aïllant es determina amb l'expressió següent:

$$V_{aïllant} = S_{reactor\ extern} \cdot X_{aïllant} \quad \text{Equació 12.6.2.24}$$

$$S_{reactor\ extern} = S_{carcassa\ extern} + S_{capçal\ extern}$$

$$S_{reactor\ extern} = \pi \cdot D_e \cdot alçada\ de\ líquid + 0,931 \cdot D_e^2 = 69,60m^2$$

$$\mathbf{V_{aïllant} = 5,46m^3}$$

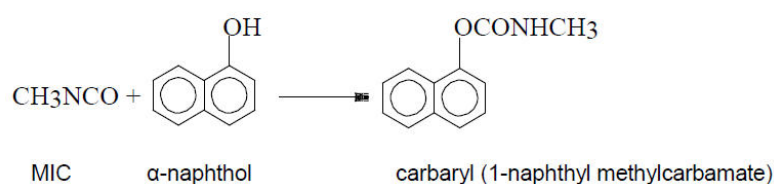
**RESUM DEL DISSENY MECÀNIC**

DISSENY MECÀNIC	
Material	Hasteloy B-2
Pressió de disseny (atm)	3,33
Temperatura de disseny (°C)	117
DIMENSIONS	
Diàmetre intern (m)	4,00
Diàmetre extern (m)	4,02
Alçada cos (m)	8,00
Alçada de capçals (m)	0,82
Alçada total (m)	9,63
Volum equip (m <sup>3</sup> )	108
Agitador	Hèlix
ESPESSORS	
Espessor paret (mm)	10
Espessor capçals (mm)	10
PES	
Equip buit (Kg)	16.596
Equip en operació (Kg)	107.705

**12.6.3 Reactor catalític de formació de Carbaryl****12.6.3.1 Introducció**

De forma general les reaccions entre components amb grups isocianats i components orgànics amb grups hidroxils formen carbamats, els productes d'aquest tipus de reaccions van des de polímers senzills fins a molècules complexes de productes farmacèutics i pesticides, com en el cas del Carbaryl.

La formació de Carbaryl ve donada per la reacció entre l'1-naphtol i el MIC en presència d'una resina catalítica d'intercanvi aniònic segons l'estequiometria següent:



L'ús d'aquest tipus de catàlisis elimina problemes en la separació catalitzador-producte un cop finalitzada la reacció i permet treballar en continu fent passar la solució reactiva per un llit catalític fix amb un conseqüent estalvi econòmic en el procés de purificació i per tant en la seva producció.

Per altra banda aquest tipus de resines d'intercanvi aniònic eviten la formació de productes secundaris no desitjats i poden ser regenerades *in situ* amb bases inorgàniques fortes, un producte fàcil d'obtenir i amb un baix valor econòmic.

Per tal de dissoldre els reactius s'utilitzen de forma habitual el benzè, el toluè o el cloroform, en aquest cas es fa servir el toluè igual que en la resta d'operacions de la planta.

La temperatura d'operació per a aquesta reacció no és un factor crític, típicament es treballa en un rang entre els 20 i els 100°C tenint en compte que en el moment d'escollir la temperatura de treball s'han de considerar les solubilitats dels reactius, el punt d'ebullició del toluè (110°C), la velocitat de reacció i la temperatura màxima que admet el catalitzador. Amb aquestes premisses es decideix que el reactor treballarà a uns 93°C de mitjana.

La formació de Carbaryl és un procés exotèrmic i caldrà disposar d'un sistema de bescanvi de calor per assegurar que la temperatura es manté el més constant possible.

La pressió de treball tampoc és un paràmetre crític en la reacció i en la major part dels casos treballar a pressió atmosfèrica és el més habitual.

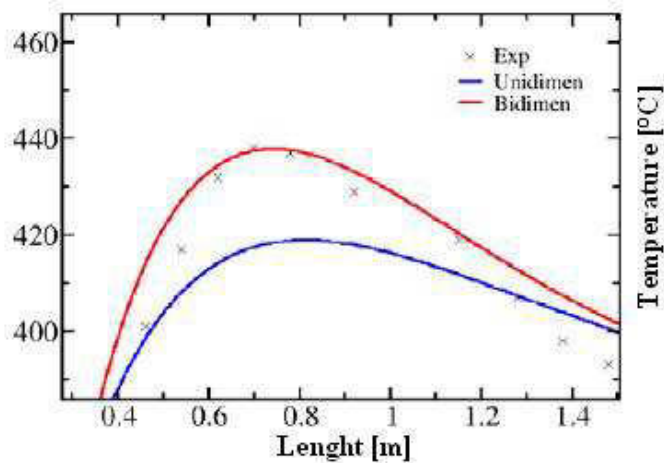
### **REACTORS DE LLIT FIX MULTITUBULARS**

Per a reaccions que tenen lloc en un llit catalític fix el més habitual és l'ús de reactors multitubulars. Aquests reactors contenen diferents tubs empacats amb partícules de catalitzador en el seu interior i operen en posició vertical.

Degut a la necessitat d'eliminar calor no és possible utilitzar un sol tub de gran diàmetre i en el seu lloc es dissenyen reactors formats per més d'un tub en un sol cos. L'intercanvi de calor s'aconsegueix fent circular un fluid tèrmic per l'espai entre tubs, anomenat carcassa.

L'inconvenient principal d'aquest sistema de refrigeració és que la major part de reacció té lloc prop de l'entrada del tub, quan hi ha més concentració de reactius i la velocitat és més alta. A mesura que la mescla de reacció es desplaça cap amunt va disminuint, amb la qual cosa la temperatura del reactor és quasi sempre major a l'entrada que a la sortida. Això és degut a que la calor alliberada és més gran que la que pot transferir-se al fluid refrigerant i la temperatura de la mescla augmenta fent que la velocitat de reacció també incrementi. Aquest fenomen té lloc fins que comencen a esgotar-se els reactius, llavors, la velocitat disminueix i la calor s'elimina per la paret dels tubs més fàcilment.

Aquesta situació fa que aparegui un màxim en la corba temperatura-longitud de reactor similar a la de la figura 12.6.3.1.



**Figura 12.6.3.7** Evolució de la temperatura al llarg d'un reactor multitubular de llit fix

La regeneració del catalitzador per a recuperar la seva activitat pot causar problemes en els reactors de llit fix, en la majoria dels casos el catalitzador és molt valuós i no és viable tractar-lo com a residu quan es desactiva.

Si l'activitat del catalitzador disminueix amb el temps poden fer-se diverses regeneracions del mateix però, tot i que aquest procés sigui senzill i econòmic, la parada i posta en marxa de l'equip pot arribar a ser una operació complicada i amb un cost econòmic elevat. El límit econòmic relacionat amb el temps en que el reactor resta parat depèn de cada procés en particular, però, en general, si l'activitat del catalitzador no es pot mantenir durant mesos, la pèrdua de producció durant la regeneració tindrà un impacte important sobre el balanç econòmic de la planta.

La regeneració del catalitzador "in situ" és la forma més efectiva de solucionar aquest entrebanc, però això requereix disposar de més d'un reactor de manera que, quan un s'estigui regenerant, l'altre pugui continuar operant amb normalitat i la planta treballi sempre en continuu.

Per al disseny d'aquest reactor s'han utilitzat les dades de la patent [4,278,807 "PROCESS FOR PRODUCTION OF 1-NAPHTHOL METHYL CARBAMATE", Inventors: Eugene J. Boros, David W. Peck, Assignee: Union Carbide Corporation, New York. Jul. 14, 1981].

A continuació s'adjunta una taula amb les dades que s'han utilitzat principalment per al disseny del reactor de formació de Carbaryl.

**TABLE I**

**CONTINUOUS REACTIONS  
REACTION OF MIC WITH 1-NAPHTHOL OVER  
AMBERLYST A-21 ION EXCHANGE RESIN**

Example Number	I	II	III	IV
Feed Composition, wt. %:				
1-Naphthol	18.0	18.1	18.0	17.9
MIC (methyl isocyanate)	7.2	6.3	7.2	7.5
Toluene	74.8	75.6	74.8	74.6
MIC: 1-Naphthol mole ratio:	1.01	0.87	1.01	1.05
Feed Rate, cc/min.:	40	25	25	32
Temperature, °C.: Jacket:	85	84	83	83
Reactor Bottom	76	84	74	74
Reactor Middle	94	91	93	92
Reactor Top	87	87	88	88
Product (1-Naphthyl methylcarbamate) Yield, %	85.3	86.5	91.2*	88.2
Productivity:				
lb. Product/lb Resin/hr	5.4	2.4	3.2	4.2
Product Purity:	99.8	99.8	99.8	—

\*Includes second crop of crystals.

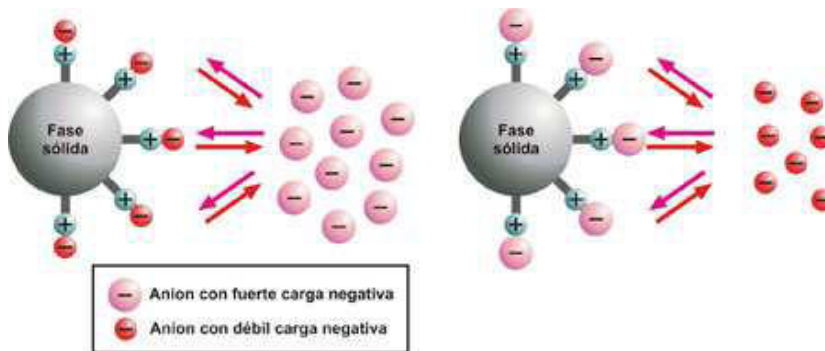
Figura 12.6.3.2 Característiques de l'assaig a mida pilot de la patent [4,278,807] d'on s'han obtingut les dades principals per al disseny del reactor de formació de Carbaryl.

### 12.6.3.2 Catalitzador

#### INTERCANVI IÒNIC

L'intercanvi iònic és una reacció química reversible que té lloc quan l'ió d'una dissolució s'intercanvia per un altre ió del mateix signe que es troba unit a una partícula sòlida immòbil.





*Figura 12.6.3.3 Esquema microscòpic de la reacció d'intercanvi iònic*

En la majoria dels casos el material sòlid utilitzat és un producte sintètic amb un poder elevat d'intercanvi iònic: les resines intercanviadores de ions.

Aquestes resines estan constituïdes per una estructura polimèrica macromolecular de pes molecular elevat que actua com a suport dels grups funcionals i caracteritzen les propietats de la resina. Al mateix temps aquesta estructura dona a la resina unes característiques mecàniques importants com la resistència a l'impacte, la fricció, la compressió, la resistència química i la resistència tèrmica que li permeten suportar diferents requeriments durant el seu us.

Hi ha dues característiques destacades entre les diverses qualitats de les resines d'intercanvi iònic:

- La qualitat del grup funcional característic.
- La naturalesa de l'ió mòbil.

Coneixent el polímer utilitzat i el grup funcional present, es pot caracteritzar cada resina i segons els ions que intercanvien les resines es poden classificar en:

1. Resines catióniques d'àcid fort: intercanvien ions positius, cations. Funcionen a qualsevol pH i es regeneren habitualment amb HCl.
2. Resines catióniques d'àcids febles: tenen menor capacitat d'intercanvi, no funcionen a pH baixos i s'inflen molt, la qual cosa fa que les pèrdues de càrrega siguin elevades. Són resines molt eficients i necessiten menys àcid clorhídric per a la seva regeneració.

3. Resines aniòniques de bases fortes: eliminen tots els anions, ions de càrrega negativa, i necessiten una gran quantitat de regenerant, normalment NaOH.
4. Resines aniòniques de base feble: són resines molt eficients, eliminen anions d'àcids forts i requereixen menys NaOH en la seva regeneració.

Els grups funcionals són bàsicament de quatre tipus:

- Resina catiònica

- Sulfònica (-SO<sub>3</sub>H, -SO<sub>3</sub>Na)
- Carboxílica (-COOH, -COOK)

- Resina aniònica

- Aminas (-NH<sub>2</sub>, -NHR, -NR<sub>2</sub>)
- Amoni quaternàries (Cl<sup>-</sup> que es transformen sota la forma OH<sup>-</sup>)

Les resines són insolubles en aigua i es presenten en forma d'esferes o perles de 0,3 a 1,2mm de mida efectiva.

El seu principal avantatge és que poden recuperar a seva capacitat d'intercanvi original mitjançant el tractament amb solucions regenerants.

### **PRODUCTE SECUNDARI EN LA FORMACIÓ DE CARBARYL**

Diferents tècniques comercials de producció de Carbaryl tenen com a inconvenient la formació del producte secundari 1-naphthyl 2,4-dimethylallophanate. La seva presència en la reacció és un inconvenient ja que disminueix, en un grau important, la puresa del pesticida incrementant a més el cost del purificació del dissolvent de procés.

Per tal de solucionar aquest problema i minimitzar la formació del subproducte anomenat la reacció es du a terme en presència d'una resina d'intercanvi aniònic que actua com a catalitzador minimitzant l'aparició de 1-naphthyl 2,4-dimethylallophanate.

El tipus de resina aniònica utilitzada juga un paper important en el procés. Tant les resines d'intercanvi aniònic de base feble com les de base forta actuen com a catalitzador, les febles tenen un grup funcional amina i les fortes un amino quaternari que reaccionen amb l'àcid clorhídric quedant catalíticament inactives. La diferència

principal entre les bases fortes i les febles és que les primeres interaccionen amb sals inorgàniques, com ara el clorur de sodi, la qual cosa no interessa quan aquestes fan de catalitzador ja que després de la seva regeneració apareix producte secundari no desitjat.

En ocasions les resines de base feble contenen una petita proporció de base forta que pot provocar la catàlisi de reaccions no desitjades, però tot i així el tipus de resines més apropiades pel procés són les bases febles.

Per evitar al màxim la presència de 1-naphthyl 2,4-dimethylallophanate, provocada per alguns grups forts que pot contenir la resina de base feble, cal posar atenció a la regeneració. Si s'utilitza NaOH o amoni dissolt en aigua les concentracions de producte no desitjat continuen essent elevades, però si la regeneració és fa combinant clorur d'amoni i hidròxid d'amoni desapareix quasi totalment la presència de 1-naphthyl 2,4-dimethylallophanate inclús aplicant més d'una regeneració al catalitzador.

En l'apartat de regeneració de la resina s'explica més detalladament com es duu a terme aquesta regeneració i quines quantitats de producte s'utilitzen.

### **AMBERLYST A-21**

La resina utilitzada en la producció de Carbaril és Amberlyst A21, una resina aniònica de base feble desenvolupada per eliminar materials àcids de solvents orgànics, eliminar fenol de benzè i inhibidors de monòmers.



*Figura 12.6.3.4 Aspecte macroscòpic típic d'una resina d'intercanvi iònic.*

Les taules següents recullen algunes de les característiques d'aquesta resina fabricada per la companyia Rohm and Hass.

**Taula 12.6.3.5** Recull de propietats de Amberlyst A-21

<b>PROPIETATS</b>	
Aspecte	esferes opaques
Concentració de centres actius (eq/kg)	4,6
Capacitat d'humidificació (%)	entre 56 i 62
Densitat en sec (g/L)	660
Diàmetre (mm)	entre 0,490 i 0,690
Superfície (m <sup>2</sup> /g)	35
Diàmetre de porus (Å)	110

**Taula 12.6.3.6** Condicions d'operació recomanades per Amberlyst A-21

<b>CONDICIONS D'OPERACIÓ</b>	
Rang de pH	0-14
Temperatura màxima (°C)	100
Longitud de llit mínima (m)	0,6

### **REGENERACIÓ DE LA RESINA**

El procés d'intercanvi d'ions que te lloc en la resina arriba a un punt de saturació en el qual el catalitzador ha arribat a la seva capacitat màxima d'intercanvi. En aquest moment cal regenerar la resina retornant-li la seva capacitat d'intercanviar ions fent passar una solució que li proporcioni els ions que ha perdut, això és possible perquè la reacció és reversible.

Després d'un període d'utilització, relativament curt, els grups bàsics febles del catalitzador, inicialment en la seva forma lliure, son convertits a una sal que deixa el catalitzador inactiu. Els grups bàsics forts ja inicialment es troben en la seva forma salina.

La resina ha de ser tractada per tornar a alliberar els grups bàsics febles prevenint la conversió dels grups bàsics forts per evitar la formació del subproducte 1-naphthyl 2,4-dimethylallophanate.

Per aconseguir la regeneració evitant la conversió dels grups bàsics forts, la relació entre l'hidròxid d'amoni i el clorur d'amoni utilitzats ha de ser aquella que deixi les els

grups amino quaternaris (grups bàsics forts) en la seva forma salina però que al mateix temps sigui capaç d'alliberar els grups amina.

Bibliogràficament, es coneix que aquestes concentracions són:

- 6 -10 % en pes de clorur d'amoni.

- 3 -5 % en pes de d'hidròxid d'amoni.

De forma general, la concentració de clorur d'amoni ha de ser major que la d'hidròxid d'amoni, fent que, durant la competència pel clorur entre els ions amoni i els grups amino quaternaris de la base forta, s'asseguri que la major part dels últims es mantenen en la seva forma clorur.

Durant la regeneració les condicions de pressió i temperatura no són un factor crític i es pot dur a terme a temperatura ambient i pressió atmosfèrica, tot i així, cal assegurar que la temperatura és suficient per dissoldre els components regenerants en la solució aquosa sense sobrepassar el límit de resistència tèrmica del catalitzador i que la pressió sigui capaç de vèncer la pèrdua de càrrega que es dona en el llit catalític.

La figura 12.6.3.6 mostra una taula amb diferents opcions per a la regeneració de la resina i indica quin és el mètode utilitzat en aquest cas.

**TABLE II-continued**

REGENERATION TREATMENT OF AMBERLYST A-21 ION EXCHANGE  
RESIN TO PREVENT FORMATION OF 1-NAPHTHYL 2,4 DIMETHYLALLOPHANATE  
DURING SYNTHESIS OF 1-NAPHTHYL METHYLCARBAMATE.

EXAMPLE	FIRST TREATMENT SOLUTION		SECOND TREATMENT SOLUTION		% 1-NAPHTHYL 2,4-DIMETHYL- ALLOPHANATE IN PRODUCT SOLUTION, 120-MINUTE SAMPLE
		AMOUNT		AMOUNT, g	
XIII(1)	4% NaOH	300	10% CaCl <sub>2</sub>	500	0.8
XIV	4% NaOH	300	5% NH <sub>4</sub> Cl	100	0.1
XV(2)	9% NH <sub>4</sub> OH	200	none		0.2
	10% NH <sub>4</sub> Cl	400	none		0.1
XVI(2)	4% NH <sub>4</sub> OH				
	10% NH <sub>4</sub> Cl				

**Figura 12.6.3.6** Recull de diferents opcions per a la regeneració de Amberlyst A-21 i els resultats obtinguts de producte secundari [Patent 4,278,807].

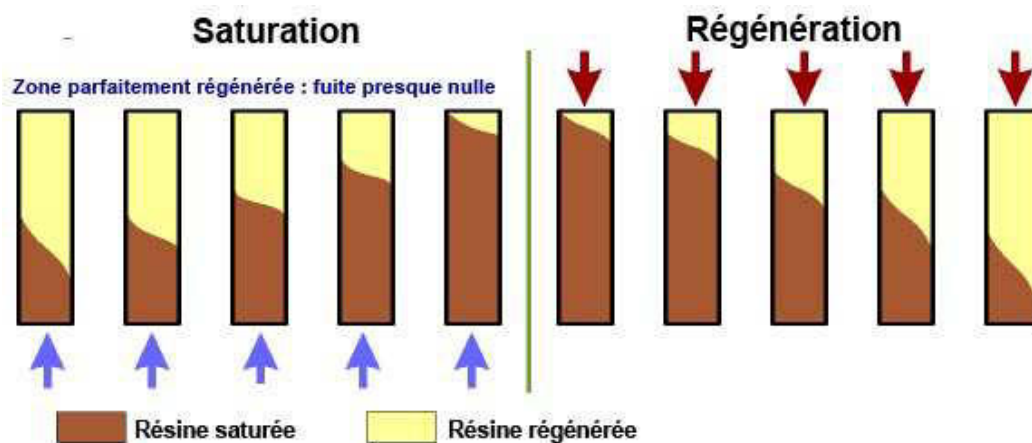
Utilitzant l'opció marcada per a la regeneració es compleixen els percentatges en pes recomanats: 4% per d'hidròxid d'amoni (entre 3 i 5%) i 10% pel clorur d'amoni (entre 6 i 10%) i s'evita la necessitat d'un segon tractament, tant sols cal fer passar una solució aquosa regenerant que conté tots dos components.

Prèvia i posteriorment al procés de regeneració es fa passar toluè per l'interior dels tubs, d'aquesta manera abans de la regeneració s'eliminen al màxim les restes de reactius, 1-naphtol i MIC (MIC especialment per la seva reactivitat amb aigua, i productes alcalins) i després de la regeneració s'arrosseguen restes de solució aquosa amb la mateixa finalitat.

Així doncs, el procés de regeneració tindrà 3 fases diferenciades:

1. Neteja de restes de reactius, 1-naphtol i MIC, amb el pas de toluè lliure d'ambdós components.
2. Regeneració de la resina amb una solució aquosa concentrada al 4% amb  $\text{NH}_4\text{OH}$  i al 10% amb  $\text{NH}_4\text{Cl}$  durant 30 minuts de temps de contacte.
3. Arrossegament de les restes de solució aquosa regenerant amb el pas de toluè pels tubs.

Tots tres cabals s'introdueixen per la part superior del reactor de forma contrària a la mescla reactiva que ho fa per la part inferior, tractant-se així d'una regeneració en contracorrent.



**Figura 12.6.3.8** Esquema del procés de regeneració d'una resina en contracorrent.

S'ha considerat que la resina permet treballar en continu durant 12 dies entre regeneració i regeneració. Tenint en compte que es disposa de dos reactor idèntics la fabricació de Carbaryl serà sempre en continu i cada 12 dies es farà la regeneració del catalitzador i el seu manteniment.

Per conèixer exactament quin és el punt en el que cal regenerar la resina és necessari fer una prova pilot a escala laboratori i interpretar les dades obtingudes, com que això

no és possible i no es tenen valors empírics del procés s'instal·la un sistema de monitorització a la sortida del reactor per tal de detectar qualsevol canvi en el corrent de sortida (temperatura, concentració de reactius...) que alerti de la colmatació dels centres actius de la resina.

### 12.6.3.3 Balanç de matèria

Fent el balanç de matèria en el reactor es coneixen els cabals d'entrada i de sortida així com la seva composició i es pot comprovar com el cabal màssic es conserva segons l'equació següent:

$$E + G = S + A \quad \text{Equació 12.6.3.1}$$

Els termes de l'equació en aquest cas es defineixen com:

- **ENTRADA (E):** El corrent d'entrada prové del tanc de mescla on s'homogeneïtzen 3 corrents diferents:
  - El primer porta el MIC des del tanc pulmó (T-501) on es troba en estat líquid a 0°C un cop preescalfat a 20°C, temperatura a la qual encara conserva l'estat líquid (Temperatura d'ebullició = 39°C).
  - El segon corrent conté 1-naphtol dissolt en toluè, aquesta dissolució es fa prèviament en el tanc T-502 a 80°C aconseguint, en aquestes condicions, la total dissolució del solut en el toluè.
  - La tercera corrent porta MIC dissolt en toluè recirculat al procés des de l'àrea de purificació per tal d'aprofitar al màxim el reactiu.

També cal tenir en compte que una petita part del Carbaryl que surt de la purificació és arrossegat amb el toluè i el MIC que es recuperen i entra al reactor.

$$\text{Entrada R2} = M_{MIC} + M_{\text{toluè}} + M_{1\text{-naphtol}} + (M_{\text{carbaril}})$$

Coneixent la quantitat de Carbaryl que cal produir anualment (10.000Tn/any) i els percentatges en massa que han d'entrar al reactor, per tal de treballar aplicant les condicions de la patent, es calculen els cabals d'entrada dels tres components seguint els passos següents:

1) Càlcul de la producció diària de Carbaryl a partir de la producció anual i els dies operatius de la planta:

$$\text{Producció diària} = \frac{10.500 \text{ Tn}}{\text{any}} \cdot \frac{1 \text{ any}}{300 \text{ dies operatius}} = 35 \text{ Tn/dia}$$

2) Càlcul del cabal màssic que ha de sortir de la planta (kg/h):

$$\text{Carbaril sortida planta} = \frac{35 \cdot 10^3 \text{ kg}}{\text{dia}} \cdot \frac{1 \text{ dia}}{24 \text{ h}} = 1.458,30 \text{ kg/h}$$

3) Càlcul del cabal màssic de Carbaryl que ha de sortir del reactor tenint en compte l'eficàcia de la purificació (0,984).

$$\text{Carbaril sortida reactor} = \frac{1.458,30 \text{ kg/h}}{0,984} = 1.482,05 \text{ kg/h}$$

Un cop conegut el cabal màssic de producte a la sortida del reactor i tenint en compte que el reactiu limitant és l' 1-naphtol, es poden calcular els cabals màssics a l'entrada amb el grau de conversió de la reacció (0,928) i la composició de l'aliment:

*Taula 12.6.3.7 Composició del corrent d'entrada al reactor de formació de Carbaryl*

<b>1-Naphtol (% massa)</b>	18,0
<b>MIC (% masa)</b>	7,2
<b>Toluè (% massa)</b>	74,8

En primer lloc el càlcul es fa pel reactiu limitant:

$$M_{1\text{-naphtol}} = \frac{M_{\text{Carbaril}}}{PM_{\text{Carbaril}}} \cdot X_R \frac{v_{1\text{-naphtol}}}{v_{\text{Carbaryl}}} \cdot PM_{1\text{-naphtol}} \quad \text{Equació 12.6.3.2}$$

$$M_{1\text{-naphtol}} = 1.127,36 \text{ kg/h}$$

A partir dels percentatges de la 12.6.3.3 es troben el MIC i el toluè:

$$M_{\text{MIC}} = M_{1\text{-naphtol}} \cdot \frac{7,2}{18}$$

$$M_{\text{MIC}} = 450,57 \text{ kg/h}$$

$$M_{\text{toluè}} = M_{1\text{-naphtol}} \cdot \frac{74,8}{18}$$

$$M_{\text{toluè}} = 4.607,00 \text{ kg/h}$$

Per últim es considera el Carbaril de la recirculació des de purificació:

$$M_{\text{carbaril}} = 23,713 \text{ kg/h}$$

L'entrada al reactor serà la suma de tots els corrents calculats:

$$\text{Entrada R3} = 6.208,639 \text{ kg/h}$$



- **GENERACIÓ (G):** Normalment la generació ve definida per la velocitat de reacció però en aquest cas la seva equació és desconeguda. El que si que es coneix és la quantitat de 1-naphtol, reactiu limitant, a l'entrada del sistema i la quantitat de Carbaryl que en resulta amb aquestes dades es pot calcular el grau de conversió i la generació de Carbaryl.

$$\text{Generació R3} = M_{\text{Carbaril}}$$

$$M_{\text{carbaril}} = X_R \cdot N_{1\text{-naphtol}} \cdot PM_{\text{carbaril}} \quad \text{Equació 12.6.3.3}$$

on:

- $N_{1\text{-naphtol}}$  = mols de 1-naphtol que entren al sistema (kmol/h).
- $X_R$  = grau de conversió calculat com:

$$X_R = \frac{N_{\text{Carbaryl real}}}{N_{\text{Carbaril teòric}}} \quad \text{Equació 12.6.3.4}$$

Per calcular la massa de Carbaryl real s'utilitzen dades de la patent esmentada i l'equació següent:

$$N_{\text{carbaril real}} = \frac{M_{\text{resina}} \cdot \text{Productivitat}}{PM_{\text{Carbaryl}}} \quad \text{Equació 12.6.3.5}$$

$$N_{\text{carbaril real}} = 1,59 \cdot 10^{-3} \text{ kmol/h}$$

La massa de Carbaryl teòrica es calcula amb la relació estequiòmetrica 1-naphtol-Carbaryl (1:1) suposant un grau de conversió del 100%

$$N_{\text{carbaril teòrica}} = \frac{M_{1\text{-naphtol}}}{PM_{1\text{-naphtol}}} \cdot \frac{v_{\text{Carbaryl}}}{v_{1\text{-naphtol}}} \cdot PM_{\text{carbaril}} =$$

$$\frac{0,247 \text{ kg/h}}{144,173 \text{ kg/kmol}} \cdot \frac{1}{1} = 1,66 \cdot 10^{-3} \text{ kmol/h}$$

Finalment el grau de conversió de la reacció és:

$$X_R = 0,928$$

$$M_{\text{carbaril}} = 0,928 \cdot \frac{7,82 \text{ kmol}}{\text{h}} \cdot \frac{201,22 \text{ kg}}{\text{kmol}} = 1.482,05 \text{ kg/h}$$

$$\text{Generació R3} = 1.482,05 \text{ kg/h}$$

- **SORTIDA (S):** La sortida del reactor es dirigeix a la purificació i està formada per Carbaryl dissolt en toluè, la part de MIC que ha entrat en excés (relació molar MIC:1-naphtol = 1,01) i l'1-naphtol que no ha reaccionat.

$$\text{Sortida R3} = M_{MIC} + M_{Toluè} + M_{Carbaril} + M_{1-naphtol} \quad \text{Equació 12.6.3.6}$$

on:

- $M_{Carbaril} = \text{Carbaril generat} = 1.482,05 \text{ kg/h}$
- $M_{Toluè} = M_{toluè \text{ entrada}} = 4.607,00 \text{ kg/h}$
- $M_{MIC} = 0,01 \cdot N_{MIC \text{ a l'entrada}} \cdot PM_{MIC} = 37,10 \text{ kg/h}$
- $M_{1-naphtol} = (1 - X_R) \cdot N_{1-naphtol \text{ entrada}} \cdot PM_{1-naphtol} = 82,49 \text{ kg/h}$

$$\text{Sortida R3} = 6.208,64 \text{ kg/h}$$

- **ACUMULACIÓ (A)** = acumulació. En aquest cas es treballa en estat estacionari i per tant el terme d'acumulació és igual a zero.

$$\text{Acumulació R3} = 0,00 \text{ kg/h}$$

Les taules següents recullen els resultats d'aquest balanç així com algunes propietats i les condicions d'operació del reactor.

**Taula 12.6.3.8** Cabals màssics d'entrada i sortida del reactor de formació de Carbaryl.

COMPONENT	Cabal d'ENTRADA (kg/h)	Cabal de SORTIDA(kg/h)
MIC	450,57	37,10
1-naphtol	1.127,36	82,49
Toluè	4.607,00	4.607,00
Carbaryl	23,71	1.482,05
<b>TOTAL</b>	<b>6.208,64</b>	<b>6.208,64</b>

**Taula 12.6.3.9** Condicions d'operació i grau de conversió en el reactor de formació de Carbaryl.

Temperatura d'operació (°C)	93
Pressió d'operació (atm)	1
Grau de conversió respecte MCC (%)	92,8

**Taula 12.6.3.10** Propietats dels corrents d'entrada i de sortida del reactor de formació de Carbaryl.

	PROPIETATS DEL FLUID	
	ENTRADA	SORTIDA
Densitat (kg/m <sup>3</sup> )	878,85	915,88
Viscositat (cP)	0,25	0,25
Cp (J/mol·K)	145,02	143,41

#### 12.6.3.4 Balanç d'energia

Juntament amb el balanç de matèria és imprescindible realitzar el balanç d'energia del reactor. La formació de Carbaryl és una reacció exotèrmica i caldrà eliminar l'energia produïda si es vol treballar a una temperatura el màxim de constant possible tenint en compte que es tracta d'un reactor multitubular.

De forma ideal es considera que el reactor és isoterm, es dissenya un bescanvi de calor i un control del mateix partint d'aquesta base i dotant al reactor d'una superfície de bescanvi superior a la necessària per tal de treballar amb marge d'eliminació de calor.

El primer pas per al disseny del bescanvi de calor és conèixer la calor que cal eliminar, els reactius entren a temperatures diferents a la d'operació, 20°C pel cas del MIC i 80°C per la dissolució de toluè amb 1-naphtol, per tal de fer que la seva temperatura s'elevi fins a la temperatura d'operació (93°C) s'aprofita la pròpia calor de reacció.

La calor a eliminar serà la calor generada per la reacció menys la que sigui absorbida pels reactius a l'entrada seguint l'equació 12.6.3.6.

$$Q = N_{\text{Carbaryl}} \cdot \Delta H_{\text{reacció}} - [\sum N_j \cdot C_{p_j} \cdot (T_r - T_e)] \quad \text{Equació 12.6.3.6}$$

on:

- $N_{\text{Carbaryl}}$  = mols de Carbaryl que es formen (kmol)
- $\Delta H_{\text{reacció}}$  = entalpia de reacció (J/kmol)
- $N_j$  = mols de reactius que entren (kmol)
- $C_{p_j}$  = calapcitat calorífica del reactiu (J/kmol)
- $T_r$  = temperatura de reacció (93 °C)
- $T_e$  = temperatura d'entrada (20°C MIC i 80°C dissolució de toluè i 1-naphtol)

La taula 12.6.3.7 recull a capacitat calorífica i els mols que entren de reactius.

**Taula 12.6.3.7** Cp i cabal molar d'entrada per els reactius del reactor de formació de MCC

	<b>Cp (kJ/kmol)</b>	<b>Mols d'entrada (kmol/h)</b>
<b>MIC</b>	101,80	7,898
<b>Disolució de toluè i 1-naphtol</b>	156,10	5.758,07

El valor de la part de calor generada per la reacció que és absorbida pels gasos d'entrada és:

$$Q_{abs} = (N_{MIC} \cdot Cp_{MIC} + N_{dissolució} \cdot Cp_{dissolució}) \cdot (Tr - Te) = 160.000,00 \text{ kJ/h}$$

Per determinar la calor de reacció ( $\Delta H_r$ ) s'utilitzen les entalpies de formació de les espècies que intervenen en la reacció a la temperatura d'operació i l'equació 12.6.3.7

**Taula 12.6.3.11** Entalpies de formació a 93°C per les espècies que participen a la reacció de formació de Carbaryl.

	<b><math>\Delta H</math> formació a (93°C) (kJ/kmol)</b>
<b>MIC</b>	-58.200,00
<b>1-naphtol</b>	-258,000,00
<b>Carbaryl</b>	-363.000,00

$$\Delta H_{reacció} = \sum (n_j \cdot \Delta H_{formació,j})_{productes} - \sum (n_j \cdot \Delta H_{formació,j})_{reactius} \quad \text{Equació 12.6.3.7}$$

on:

- j = espècies que intervenen en la reacció.
- $\Delta H_{reacció}$  = entalpia de reacció (J/mol)
- n = mols de component j formats
- $\Delta H_{formació}$  = entalpia de formació (J/mol) calculada com:

$$\Delta H_{formació} = \Delta H_{formació}^0 + Cp(T_{operació} - T_{ref}) \quad \text{Equació 12.6.3.8}$$

on:

- $\Delta H_{formació}^0$  = entalpia estàndard de formació (298K)(J/mol)
- Cp = capacitat calorífica (J/mol·K).
- $T_{operació}$  = temperatura a la que es dona la reacció (K).
- $T_{referència}$  = 298K

$$\Delta H_{reacció} = -46.800,00 \text{ kJ/kmol}$$

La calor generada per la reacció tenint en compte els mols de MCC que es formen és igual a:

$$Q_{gen} = N_{MCC} \cdot \Delta H_{reacció} \quad \text{Equació 12.6.3.9}$$

$$Q_{gen} = 7,37 \text{ kmols/h} \cdot \left( -4,68 \cdot \frac{10^7 \text{ J}}{\text{kmol}} \right) = -345.000,00 \text{ kJ/h}$$

Coneixent els dos termes de l'equació que determina la calor que cal eliminar, el seu valor finalment és:

$$Q = Q_{gen} - Q_{abs} = 185.000,00 \text{ kJ/h}$$

Un cop quantificada l'energia produïda pel procés es determina l'àrea de bescanvi de calor requerida pel sistema per tal de que l'eliminació sigui possible amb l'equació:

$$\dot{A}rea = \frac{Q}{U \cdot DTML} \quad \text{Equació 11.6.3.10}$$

on:

- Àrea = àrea de bescanvi de calor requerida (m<sup>2</sup>)
- U = coeficient de transferència de calor del sistema (W/m<sup>2</sup>·K).

S'ha escollit tenint en compte les característiques del fluid de reacció, les del toluè i les condicions del reactor. Treballant amb aquest lilit catalític fix la velocitat del fluid de reacció i del fluid refrigerant que circula per carcassa és molt petita i s'ha decidit considerar un U típica de casos en els que la transmissió de calor es dona per convecció: 50 W/m<sup>2</sup>·K.

- DTML = diferencial de temperatures mitjà logarítmic calculat com:

$$DTML = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}}$$

$$\Delta T_1 = T^{\circ} \text{entrada fluid de tubs} - T^{\circ} \text{sortida fluid de carcassa}$$

$$\Delta T_2 = T^{\circ} \text{sortida fluid de tubs} - T^{\circ} \text{entrada fluid de carcassa}$$

$$\Delta T_1 = 93 - 45 = 48$$

$$\Delta T_2 = 93 - 35 = 58$$

$$DTML = \frac{48 - 58}{\ln \frac{48}{58}} = -63$$

Amb aquests valors s'obté una àrea de bescanvi requerida de:

$$\text{Àrea} = \frac{-5,13 \cdot 10^4 \text{J/s}}{\frac{50 \text{W}}{\text{m}^2} \cdot \text{K} \cdot -63} = 17 \text{ m}^2$$

El cabal de toluè necessari per aconseguir aquest bescanvi de calor es pot calcular amb l'equació següent:

$$Q = m_{\text{toluè}} \cdot C_{p_{\text{toluè}}} \cdot \Delta T \quad \text{Equació 12.6.3.11}$$

on:

- $m_{\text{toluè}}$  = cabal màssic de toluè. (kg/h)
- $C_{p_{\text{toluè}}}$  = capacitat calorífica del toluè. (kJ/kg·K)
- $\Delta T$  = salt tèrmic del toluè entre l'entrada i la sortida. El salt tèrmic és de 5°C.

$$m_{\text{toluè}} = \frac{1,85 \cdot 10^8 \text{J/h}}{\frac{1694 \text{J}}{\text{kg}} \cdot 10} = 10.907 \text{ kg/h}$$

Amb el balanç de matèria i d'energia s'han obtingut les dades necessàries per fer el disseny funcional del reactor amb el que es calcularà el seu volum i el nombre de tubs que el formen.

### 12.6.3.5 Disseny funcional

El disseny funcional d'aquest reactor s'ha fet prenent com a referència la patent anomenada a la introducció, per tal d'aconseguir la mateixa productivitat que en el cas de l'assaig a petita escala cal conservar el temps de residència del reactor i a partir d'aquest fer el càlcul de la resta de paràmetres.

Per al càlcul del temps de residència s'utilitza l'equació següent:

$$\tau = \frac{V}{Q} \quad \text{Equació 12.6.3.12}$$

on:

- $\tau$  = temps de residència (min)
- $Q$  = cabal volumètric d'entrada de la patent =  $25 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{min}$
- $V$  = volum del tub utilitzat en la patent =  $2,96 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3$

El valor del temps de residència pel qual caldrà dissenyar el reactor a escala real és:

$$\tau = 11,84 \text{ min}$$

El seu càlcul de forma equivalent es pot fer utilitzant l'equació:

$$\tau = \frac{H}{v} \text{ Equació 12.6.3.13}$$

on:

- $v$  = velocitat del fluid (m/min)
- $H$  = alçada del tub (m)

Es decideix establir un diàmetre de tub, dins dels rangs típics, igual a 1,5 polzades i una longitud de 5 metres. A partir d'aquí es calcula quina és la relació d'alçades entre el tub utilitzat a la patent i els tubs que s'utilitzen per al reactor i es calcula la velocitat del fluid en el reactor dissenyat amb la mateixa:

$$\text{Relació d'alçades} = \frac{5\text{m}}{0,58\text{m}} = 8,56$$

$$\text{Velocitat en el reactor} = 8,56 \cdot \left(\frac{H}{\tau}\right) = 0,42\text{m/s}$$

Amb una Longitud de tubs de 5 metres i una velocitat de 0,42m/s el temps de residència continuarà sent de 11,84 minuts.

El següent pas és el càlcul del nombre de tubs necessaris per a complir l'objectiu de producció de la planta de Carbaryl. Per fer-ho es segueixen els passos següents:

1. Càlcul de la quantitat de resina per volum de tub utilitzada en la patent:

$$\text{Resina utilitzada} = \frac{0,1\text{kg}}{2,96 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3} = 337,82 \text{ kg/m}^3$$

2. Càlcul del volum d'un dels tubs del reactor i quantitat de resina per cada tub:

$$\text{Volum de tub} = \frac{\pi}{4} \cdot D^2 \cdot h = 5,70 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3$$

$$\text{Resina per tub} = 5,70 \cdot 10^{-3} \text{m}^3 \cdot \frac{337,82 \text{kg}}{\text{m}^3} = 1,93 \text{ kg}$$

3. Càlcul de la quantitat de producte obtinguda per tub tenint en compte la productivitat de la resina i finalment el nombre de tubs:

$$\text{Carbaril objectiu} = 1,458,33 \text{ kg/h}$$

*Producte per tub = quantitat de resina · productivitat*

$$\text{Producte per tub} = 1,98 \text{kg} \cdot 3,2 \frac{\text{kg Carbaril}}{\text{kg resina} \cdot \text{h}} = 6,16 \text{ kg Carbaryl/h}$$

$$\text{Nombre de tubs} = \frac{\text{Carbaril objectiu}}{\text{Carbaril per tub}}$$

$$\text{Nombre de tubs} = \frac{1458,33 \text{ kg/h}}{6,16 \text{ kg/h}} = 236,74 \text{ tubs}$$

$$\text{Nombre de tubs} = 237$$

Un cop s'han definit el nombre de tubs es comprova que el volum que aquests proporcionen i el cabal que s'hi fa circular corresponen al temps de residència calculat.

$$Qv = \frac{Qm}{\rho_{\text{mescla}}} \quad \text{Equació 12.6.3.14}$$

on:

- $Qv$  = cabal màssic entrada (kg/h)
- $\rho_{\text{mescla}}$  = densitat de la mescla d'entrada (kg/m<sup>3</sup>)

$$Qv = \frac{6208,64 \text{ kg/h}}{874,3 \text{ kg/m}^3} = \frac{7,10 \text{m}^3}{\text{h}} = 0,12 \text{ m}^3/\text{h}$$

$$\text{Volum reactor} = N_{\text{tubs}} \cdot V_{\text{tub}} \quad \text{Equació 12.6.3.15}$$

on:

- $N_{\text{tubs}}$  = número de tubs del reactor
- $V_{\text{tubs}}$  = volum de tub (m<sup>3</sup>)

$$\text{Volum reactor} = 237 \cdot 5,70 \cdot 10^{-3} = 1,35 \text{m}^3$$



$$\tau = \frac{V}{Q} = \frac{1,35m^3}{0,12m^3/h} = 11,84 \text{ min}$$

S'ha aplicat un factor de seguretat per al sobredimensionament dels reactors del 35% ja que la cinètica és desconeguda i les dades per al disseny no s'han pogut comprovar de forma empírica, tenint en compte aquest factor, el nombre de tubs final és:

$$V = 1,35 \cdot 1,35m^3 = 1,82m^3 \quad \text{Equació 12.6.3.16}$$

$$N_{tubs \text{ final}} = \frac{1,82m^3}{5,70 \cdot 10^{-3}} = 319,30 = 320 \text{ tubs}$$

Abans de procedir amb el disseny mecànic cal assegurar que l'àrea de bescanvi de calor que proporcionen aquest nombre de tubs és, com a mínim, igual a l'àrea requerida:

$$\dot{A}rea = \pi \cdot D \cdot L \cdot N_{tubs} \quad \text{Equació 12.6.3.17}$$

$$\dot{A}rea = \pi \cdot 0,038m \cdot 5m \cdot 320 = 192 \text{ m}^2$$

Amb l'objectiu d'emmagatzemar la mínima quantitat de MIC i, al mateix temps, paralitzar el mínim el procés durant la regeneració de la resina i el manteniment d'aquest reactor, es decideix doblar l'equip i tenir sempre un reactor en funcionament.

Seria possible mantenir la producció de Carbaryl amb un sol reactor fent que aquest treballés per sobre de la demanda generada pel mercat de manera que, quan aquest estigues parat per regeneració i manteniment, l'excés de producció cobrés la demanda, però això implicaria emmagatzemar el MIC que es produït durant aquest temps ja que la resta de planta continuaria funcionant.

Tenint en compte que es preten emmagatzemar la quantitat mínima de MIC, es construeixen dos reactors idèntics i es treballa de forma contínua consumint total o quasi totalment la massa de MIC generada.

Ambdós reactors són idèntics mecànicament.

### 12.6.3.6 Disseny mecànic

El disseny mecànic del reactor multitubular es realitza combinant el mètode de Kern, per al disseny de bescanviadors de carcassa i tubs, i el codi ASME per al disseny d'equips a pressió, per tal de calcular els espessors tant de tubs com de carcassa en les condicions de treball.

Per l'interior dels tubs hi circularà la mescla gasosa de reacció i per carcassa l'oli tèrmic encarregat d'emportar-se la calor de reacció.

En primer lloc, a partir de les condicions d'operació, es defineixen la pressió i la temperatura de disseny i es decideix el material del que es farà el reactor tenint en compte les característiques dels fluids que hi circulen.

- Pressió de disseny: la pressió de disseny per aquest reactor serà igual per al fluid de carcassa que per el de tubs i es calcula aplicant la norma següent:

$$Pressió\ de\ disseny = \max(1,1 \cdot P.\ operació, P.\ operació + 2atm)$$

$$Pressió\ de\ disseny = \max(1,1atm + 3atm) = 3atm$$

- Temperatura de disseny: la temperatura de disseny s'estableix 20°C per sobre de la temperatura d'operació del reactor i és lleugerament diferent en el cas de tubs i de carcassa:

$$Temperatura\ de\ disseny\ tubs = (93^{\circ}C + 20^{\circ}C) = 113^{\circ}C$$

$$Temperatura\ de\ disseny\ carcassa = (40^{\circ}C + 20^{\circ}C) = 60^{\circ}C$$

S'utilitza com a temperatura de disseny la més desfavorable, en aquest cas la més alta:

$$Temperatura\ de\ disseny = 113^{\circ}C$$

- Material: Per decidir quin és el millor material per aquest reactor es té en compte que es treballa amb toluè majoritàriament i, en menor mesura però també important, amb NH<sub>4</sub>Cl i NH<sub>4</sub>OH durant la regeneració.

Consultant la taula de la figura següent s'assumeix que el Hasteloy B-2 utilitzat per a la resta d'equips també és la millor opció, tot i que la figura faci referència Hasteloy C (A = Excelent).

Per el cas dels productes manipulats durant la regeneració el Hasteloy B-2 és també viable amb una corrosió menor de 0,508mm/any.

### CHEMICAL RESISTANCE GUIDE

CHEMICAL	FORMULAS	PLASTIC										ELASTOMER					SEAL		METAL						
		APPROX. SP. GRAVITY @ 100% CONC. % CONCENTRATION	PVC	CPVC	POLYETHYLENE FLUORIDE (PEF)	POLYETHYLENE (PE)	DURAPLUS ABS	RYTON	HALAR	PEEK	TEFLON	EPOXY	VINYLESTER	POLYSULFONE	VITON	EPDM	BUNA N (NITRILE)	NEOPRENE	304 STAINLESS STEEL	316 STAINLESS STEEL	TITANIUM	HASTELLOY C			
Tertiary Butyl Alcohol	-	-	68	68	68	250	-	-	X	-	-	-	250	-	-	-	70	-	-	X	-	-	A	-	-
Tetrachlorethane	CHCl <sub>2</sub> CHCl <sub>2</sub>	-	X	X	X	250	-	-	X	-	-	-	350	-	-	-	70	X	X	X	-	-	A	-	-
Tetraethyl Lead	Pb(C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>4</sub>	-	1.65	72	72	73	250	-	-	-	-	-	250	-	-	-	150	X	X	X	-	-	-	-	-
Tetrahydrofuran	-	-	-	X	X	X	X	X	X	200	X	-	350	120	100	-	X	X	X	X	-	-	-	X	-
Tetralin (Tetrahydro-Naphthalene)	C <sub>10</sub> H <sub>12</sub>	-	-	X	X	X	-	X	X	X	-	-	-	-	-	-	-	68	X	X	X	-	-	-	-
Thionyl Chloride	SOCl <sub>2</sub>	-	1.64	X	X	X	X	X	X	X	-	121	-	350	X	X	-	73	X	X	X	-	-	X	X
Thread Cutting Oils	-	-	-	140	72	120	150	-	-	-	-	250	-	400	-	-	-	70	X	-	70	-	B	B	
Titanium Tetrachloride	TiCl <sub>4</sub>	-	-	X	X	X	X	-	-	-	-	-	-	400	-	-	-	150	X	X	X	-	-	C	C
Titanous Sulfate	Ti <sub>2</sub> (SO <sub>4</sub> ) <sub>3</sub>	-	1.47	140	180	180	250	-	-	-	-	-	-	350	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
Toluene	CH <sub>3</sub> C <sub>6</sub> H <sub>5</sub>	-	0.9	X	X	X	150	X	X	X	200	121	-	350	150	X	-	70	X	X	-	A	A	A	A
Tomato Juice	-	-	-	140	180	150	250	70	140	68	200	-	-	400	-	-	-	200	200	100	150	-	C	B	

Figura 12.6.3.9 Dades detallades de corrosió en materials de construcció [HARRINGTON]

Amb les condicions de disseny definides i les dimensions dels tubs fixades es pot començar amb el disseny.

- **Característiques dels tubs:** la longitud i el diàmetre intern dels tubs s'han fixat en l'apartat del disseny funcional del reactor. Amb la normativa ASME es calcula el seu espessor i per tant el diàmetre extern.

$$Longitud\ tubs = 5m$$

$$Diàmetre\ intern\ de\ tubs = 1,5\ polzades = 0,038m$$

$$espessor\ tubs = \frac{P_t \cdot D_{int}}{2 \cdot (S \cdot E - 0,6 \cdot P_t)} + CA \quad \text{Equació 12.6.3.10}$$

on:

- $P_t$  = pressió interna dels tubs (bar) = 3,03
- $D_{int}$  = diàmetre intern (mm) = 38
- $E$  = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)
- $S$  = càrrega admissible del material (bar) = 7583,40 bar

La tolerància de fabricació per aquest cas, un cilindre, és nul·la, el sobre espessor per corrosió del material és de 0,508mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobreesspessor serà 7,62 mm.

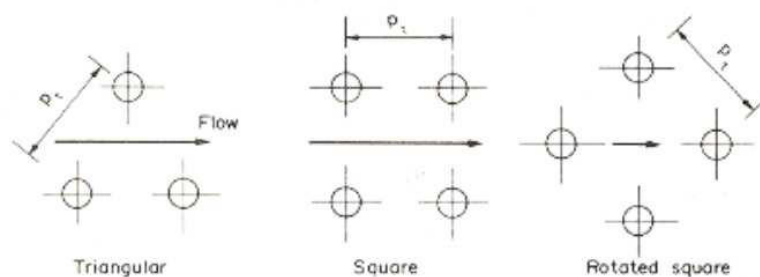
El valor d'espessor obtingut és de 0,009mm, tenint en compte el sobreesspessor l'espessor dels tubs serà de 7,68mm i per tal d'evitar costos de fabricació per a gruixos específics s'utilitza un valor de 8mm.

***espessor dels tubs = 8mm.***

*diàmetre extern dels tubs =  $0,038m + (2 \cdot 0,008mm) = 0,0541m$ .*

- Distribució dels tubs: la distribució dels tubs segueix tres esquemes típics: triangular, quadrat i romboïdal. En aquest cas s'ha escollit un pitch (distància entre els centres de dos tubs consecutius) triangular degut a que aquesta disposició proporciona altes velocitats de transferència de calor.

El pitch recomanat és de 1,25 vegades el diàmetre extern del tub.



**Figura 10** Possibles distribucions de tubs.

$$pitch = 1,25 \cdot D_{ext tub} = 68mm$$

- Càlcul del diàmetre de carcassa ( $D_c$ ): per calcular el diàmetre de carcassa s'ha de sumar el diàmetre del feix de tubs i l'espai entre aquest i la paret externa de la carcassa que dependrà bàsicament del tipus de carcassa utilitzada.

<b>Fixed and U-tube</b>	Tipo U/L/M/N
<b>Outside packed head</b>	Tipo P
<b>Split-ring floating head</b>	Tipo S/W
<b>Pull-trough floating head</b>	Tipo T

*Figura 12.6.3.11 Possibles tipus de carcassa.*

S'escull una carcassa de tipus T ja que és la que proporciona un espai entre carcassa i feix de tubs més elevat i no està fixada amb la qual cosa permet desmuntar els tubs per al seu manteniment.

El diàmetre del feix de tubs es calcula com:

$$D_b = D_{ext} \cdot \left(\frac{N_t}{K_1}\right)^{1/n_1} = 1,36m$$

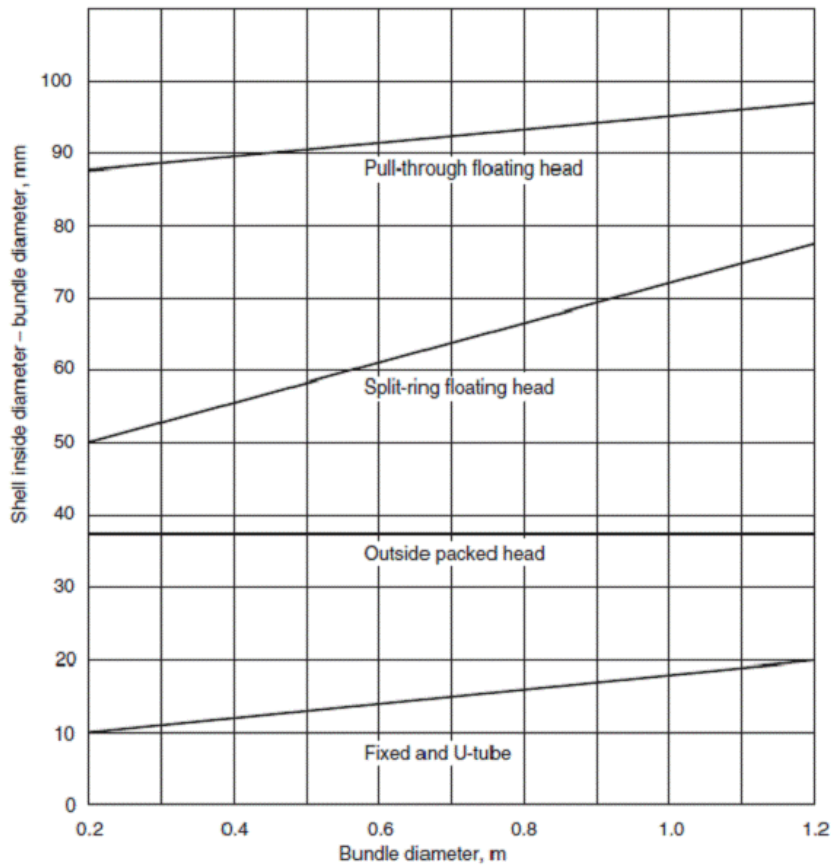
on:

- $N_t$ = numero de tubs
- $D_b$ = diàmetre del feix de tubs (mm)
- $D_{ext}$ = diàmetre exterior dels tubs (mm)
- $N_1$  i  $K_1$  son funció del pitch escollit i del numero de passos per tubs segons la següent taula:

*Taula 12.6.3.12 Valors de les constants  $K_1$  i  $n_1$  per pitch triangular.*

PITCH TRIANGULAR	
Passos pel tub	1
$K_1$	0,319
$n_1$	2,142

L'espai entre la carcassa i el feix de tubs es pot trobar gràficament amb la figura següent. Cal conèixer el diàmetre del feix de tubs ( $D_b$ ) i situar-lo a l'eix x, a l'eix y es trobarà la diferència del diàmetre de carcassa i del diàmetre del feix de tubs ( $D_s - D_b$ ).



**Figura 12.6.3.12** Distància entre carcassa i feix de tubs.

El diàmetre de carcassa és:

$$D_s = \text{valor de l'eix } y + D_b = 1,46 \text{ m}$$

- Càlcul del numero de pantalles deflectores i separació entre elles: les pantalles deflectores compleixen dos funcions principals:
  - c. Serveixen de suport als tubs en la posició adequada durant el seu muntatge i operació i prevenen vibracions d'aquests causades pel flux d'oli tèrmic.
  - d. Serveixen de guia per l'oli tèrmic a través dels tubs, incrementant-ne la velocitat i el coeficient de transferència de calor.

Hi ha dos paràmetres que determinen les característiques geomètriques de les pantalles deflectores:

3. L'altura lliure de la pantalla (*baffle cut*), espai que queda entre pantalla i carcassa per on passa el fluid. Correspon a un percentatge entre el 15 i el 45% del diàmetre de carcassa, com a valor òptim s'agafa un 25%.

$$baffle\ cut = 0,25 \cdot 1,46m = 0,37\ m$$

4. Espai entre pantalles ( $I_B$ ) que pren un valor entre 0,2 i 1 vegades el diàmetre de carcasses agafant com a numero òptim 0,4.

$$I_B = 0,4 \cdot 1,46 = 0,58\ m$$

El numero de pantalles deflectores es pot calcular com:

$$N^{\circ}\ pantalles\ deflectores = \frac{L}{I_B} - 1 = \frac{5}{0,58} - 1 = 7,62$$

$$N^{\circ}\ pantalles\ deflectores = 8$$

#### Espessor de la carcassa. Càlcul a pressió interna

$$espessor\ de\ carcassa = \frac{P \cdot R_{int}}{S \cdot E - 0,6 \cdot P} + C.A \quad \text{Equació 12.6.3.11}$$

on:

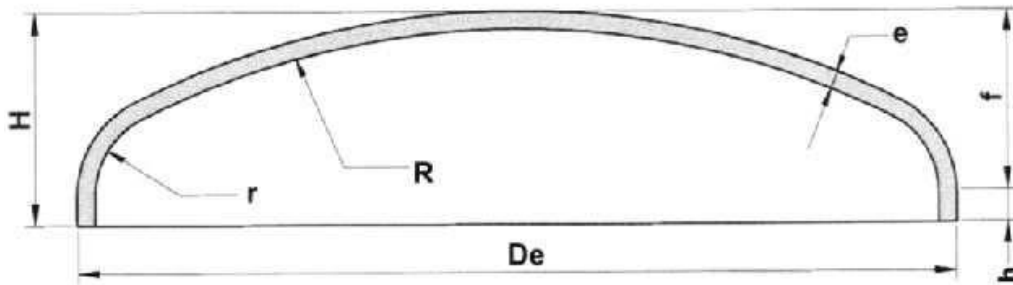
- P = pressió de disseny del recipient (bar) = 3,03
- $R_{int}$  = radi intern (mm) = 730
- E = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)
- S = càrrega admissible del material (bar) = 7583,40 bar
- C.A = sobreesspessor (mm)

La tolerància de fabricació per aquest cas, un cilindre, és nul·la, el sobre esspessor per corrosió del material és de 0,508mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobreesspessor serà 7,62 mm.

El valor obtingut és de 0,34 mm i tenint en compte el sobreesspessor escollit l'espessor de la carcassa serà de 7,96 mm i per tal d'evitar costos de fabricació específics s'utilitzarà un valor de:

$$espessor\ de\ carcassa = 8mm$$

- Espessor dels capçals. Càlcul a pressió interna Els tipus de capçals més utilitzats són el toriesfèric, l'hemisfèric i l'el·lipsoïdal, en aquest cas s'utilitza el toriesfèric ja que és el més comú en la indústria química.



**Figura 12.6.3.13** Esquema de les dimensions d'un capçal tipus toriesfèric.

Aquest capçal ve definit pel radi de la corona (R) i el radi del colze (r) que es calculen respecte al diàmetre de la carcassa.

$$R = D \text{ intern} = 1460 \text{ mm}$$

$$r = 0,1 \cdot D = 146 \text{ mm}$$

$$\frac{R}{r} = 10$$

Per una relació L/r menor de 16 l'espessor es calcula amb l'expressió següent:

$$\text{espessor capçal} = \frac{P \cdot R \cdot M}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad \text{Equació 12.6.3.12}$$

on:

- P = pressió de disseny del recipient (bar) = 3,03
- M = factor que depèn de la relació R/r, en aquest cas igual a 1,54
- E = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)
- S = càrrega admissible del material (bar) = 7583,4 bar
- C<sub>1</sub> = marge per corrosió (mm) = 7,62
- C<sub>2</sub> = tolerància de fabricació (mm) = 10% de l'espessor.

Finalment el valor de l'espessor dels capçals, evitant costos de fabricació:

$$\text{espessor dels capçals} = 10 \text{ mm}$$



- Alçada de l'equip: a continuació es definiran les dimensions relacionades amb l'alçada dels capçals: H, h i f i es calcularà l'alçada real de l'equip.

$$h = 3,5 \cdot t_f = 35mm$$

$$f = 0,1955 \cdot D_e - 0,455 \cdot t_f = 280,88mm$$

$$H = h + f = 315,88mm$$

L'alçada total de l'equip serà doncs:

$$\mathbf{Alçada\ total = Alçada\ cos + (2 \cdot H) = 5,63m}$$

- Espessor de la placa tubular

$$t_p = \frac{D_s}{2} \cdot \sqrt{\frac{P_c}{S}} \quad \text{Equació 12.6.3.13}$$

on:

- $t_p$  = espessor de la placa tubular (mm)
- $P_c$  = pressió de disseny de carcassa (bar) = 3,03
- $D_s$  = diàmetre de la carcassa (mm) = 1460
- $S$  = càrrega admissible del material (bar) = 7583,40 bar

Com en el cas anterior cal sumar un 10% d'espessor per defectes de fabricació i 7,62mm per l'efecte de la corrosió i seleccionar un espessor que no suposi un cost extra de fabricació, s'obté finalment:

$$\mathbf{espessor\ de\ la\ placa\ tubular = 25mm}$$

- Volum de l'equip: El volum de l'equip té en compte el volum de la carcassa i el volum dels fondos calculats amb les formules següents:

$$V_{carcassa} = \left(\frac{\pi}{4}\right) \cdot D_{int}^2 \cdot L \quad \text{Equació 12.6.3.14}$$

$$V_{fondo} = \left(\frac{\pi}{8}\right) \cdot 0,162 \cdot D_{int}^3 \quad \text{Equació 12.6.3.15}$$

on:

- $D_{int}$  = diàmetre intern de la carcassa (m)
- $L$  = longitud del reactor (m)

$$V_{carcassa} = 8,37 \text{ m}^3$$

$$V_{fondo} = 0,26 \text{ m}^3$$

$$V_{equip} = V_{carcassa} + 2 \cdot V_{fondo} = \mathbf{8,89 \text{ m}^3}$$

- Pes de l'equip buit: El pes del material es calcula tenint en compte la carcassa i els tubs amb les equacions següents.

$$M_{carcassa} = \rho_{Hasteloy B-2} \cdot S_{carcassa \text{ int}} \cdot t \quad \text{Equació 12.6.3.16}$$

$$M_{tubs} = \rho_{Hasteloy B-2} \cdot N_{tubs} \cdot \frac{\pi}{4} \cdot (D_{ext}^2 - D_{int}^2) \cdot L_t \quad \text{Equació 12.6.3.17}$$

$$M_{capçal} = \rho_{Hasteloy B-2} \cdot S_{capçal \text{ int}} \cdot t \quad \text{Equació 12.6.3.18}$$

on:

- $M$  = pes (kg)
- $\rho_{Hasteloy B-2}$  = densitat del material = 9220 Kg/m<sup>3</sup>
- $t$  = espessor del material (m)
- $S_{carcassa \text{ intern}} = \pi \cdot Di \cdot L = 22,93 \text{ m}^2$
- $S_{capçal \text{ intern}} = 0,931 \cdot Di^2 = 1,98 \text{ m}^2$

$$M_{carcassa} = 134,61 \text{ kg}$$

$$M_{tubs} = 17.091,95 \text{ kg}$$

$$M_{capçal} = 182,56 \text{ kg}$$

Es considera un 10% més de material per tal de tenir en compte soldadures, cargols, brides i similar, essent el pes final de l'equip buit:

$$M_{total} = 1,1 \cdot (M_{carcassa} + M_{tubs} + 2 \cdot M_{capçal})$$

$$M_{total} = \mathbf{19.350,84 \text{ kg}}$$

- Pes de l'equip amb aigua: El pes de l'equip en condicions de prova es calcula com:

$$M_{aigua} = M_{buit} + 10^3 \cdot (V_{carcassa} - V_{tubs \text{ ext}} + V_{tubs \text{ int}} + 2 \cdot V_{capçal}) \quad \text{Equació 12.6.3.19}$$

on:

- $M_{\text{aigua}}$  = pes de l'equip amb aigua (kg)
- $M_{\text{buit}}$  = pes de l'equip buit (kg)
- $V_{\text{carcassa}}$  = volum de la carcassa (m3)
- $V_{\text{tubs extern}} = \left(\frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{ext}}^2 \cdot L\right) \cdot N_{\text{tubs}} = 3,68\text{m}^3$
- $V_{\text{tubs intern}} = \left(\frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{int}}^2 \cdot L\right) \cdot N_{\text{tubs}} = 1,82\text{m}^3$
- $V_{\text{capçal}}$  = volum de capçal (m3)

$$M_{\text{aigua}} = 26.380,84 \text{ kg}$$

- Pes del reactor en operació: El pes de l'equip en operació té diferents contribucions, el pes de l'equip buit, el pes de l'oli refrigerant que circula per carcassa, el pes del fluid de reacció que circula per tubs i la massa de catalitzador del sistema.

$$M_{\text{toluè}} = \rho_{\text{toluè}} \cdot (V_{\text{carcassa}} - V_{\text{tubs}}) \quad \text{Equació 12.6.3.20}$$

on:

- $\rho_{\text{toluè}}$  = densitat del toluè (818kg/m<sup>3</sup>)
- $V_{\text{carcassa}}$  = volum de la carcassa (m3)
- $V_{\text{tubs}}$  = volum de tubs (m3)

$$M_{\text{toluè}} = 5.358,53 \text{ kg}$$

$$M_{\text{fluid}} = \rho_{\text{fluid}} \cdot V_{\text{tubs}} \quad \text{Equació 12.6.3.21}$$

- $\rho_{\text{fluid}}$  = densitat del fluid de reacció (874,3kg/m<sup>3</sup>)

$$M_{\text{fluid}} = 1.591,23 \text{ kg}$$

$$M_{\text{catalitzador}} = 616,22 \text{ kg}$$

$$M_{\text{equip operació}} = 26.916,82 \text{ kg}$$

- Espessor de l'aïllant: tot i que la temperatura de carcassa no supera els 60°C, la temperatura a la que es dona la reacció en l'interior dels tubs, és elevada i es decideix aïllar l'equip amb llana de vidre. L'espessor d'aquest aïllant és:

$$X = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{\Delta T}{D_{\text{ext}}}\right)^{\frac{1}{4}}} \quad \text{Equació 12.6.3.23}$$

on:

- $X$  = espessor de l'aïllant (cm)
- $\Delta T$  = diferència de temperatura entre l'interior i l'exterior  $(60 - 15)^{\circ}\text{C} = 54$ .
- $D_{\text{ext}}$  = diàmetre exterior del recipient (m)

Si es compara l'espessor calculat amb el que es pot trobar en les conduccions, es decideix augmentar el valor de l'espessor a el doble per assegurar un bon aïllament.

$$\mathbf{X = 6,78\ cm}$$

Aquest aïllant quedarà recobert per una capa d'alumini per tal de protegir-lo de les inclemències meteorològiques.

El volum de l'aïllant es determina amb l'expressió següent:

$$\mathbf{V_{aïllant} = S_{reactor\ extern} \cdot X_{aïllant} \quad \text{Equació 12.6.3.24}}$$

$$S_{reactor\ extern} = S_{carcassa\ extern} + S_{capçal\ extern}$$

$$S_{reactor\ extern} = \pi \cdot D_e \cdot L + 0,931 \cdot D_e^2 = 25,29\text{m}^2$$

$$\mathbf{V_{aïllant} = 1,71\text{m}^3}$$

<b>DISSENY MECÀNIC</b>	
Material	Hasteloy B-2
Pressio de disseny (bar)	3,03
Temperatura de disseny (°C)	113
Grau de conversió (%)	92,8
<b>DIMENSIONS</b>	
Diàmetre intern carcassa(m)	1,46
Diàmetre extern carcassa(m)	1,48
Diàmetre intern tubs (m)	0,0381
Diàmetre extern tubs (m)	0,0541
Alçada cos (m)	5
Alçada fons superior (m)	0,315
Alçada fons inferior (m)	0,315
Alçada total (m)	5,63
Volum total equip (m <sup>3</sup> )	8,89
Numero de tubs	320
Numero de pantalles deflectores	7
<b>ESPESSORS</b>	
Espessor tubs (mm)	8
Espessor paret (mm)	8
Espessor fons superior (mm)	10
Espessor fons inferior (mm)	10
Espessor placa (mm)	25
<b>PES</b>	
Equip buit (Kg)	19.350
Equip en operació (Kg)	26.916

### 12.6.3.7 Pèrdues de càrrega

Les pèrdues de càrrega en els reactors de llit fix són un factor molt important a tenir en compte especialment pel fluid de reacció que circula per tubs ja que aquest ha de vèncer la resistència al pas que oposen les partícules de catalitzador i cal assegurar-se de que la bomba que l'impulsa li dona la suficient potencia per travessar la totalitat del llit catalític.

Aquestes pèrdues de càrrega pel costat de tubs es calcularan tenint en compte dues contribucions:

- Pèrdues de càrrega relacionades amb la circulació d'un fluid per un tub (mètode de KERN per al disseny de bescanviadors de calor).
- Pèrdues de càrrega relacionades amb el catalitzador.

Pel costat de carcassa també es calculen les pèrdues de càrrega amb el mètode de KERN per a bescanviadors de calor per tal d'assegurar que aquestes no sobrepassen els límits típics establerts.

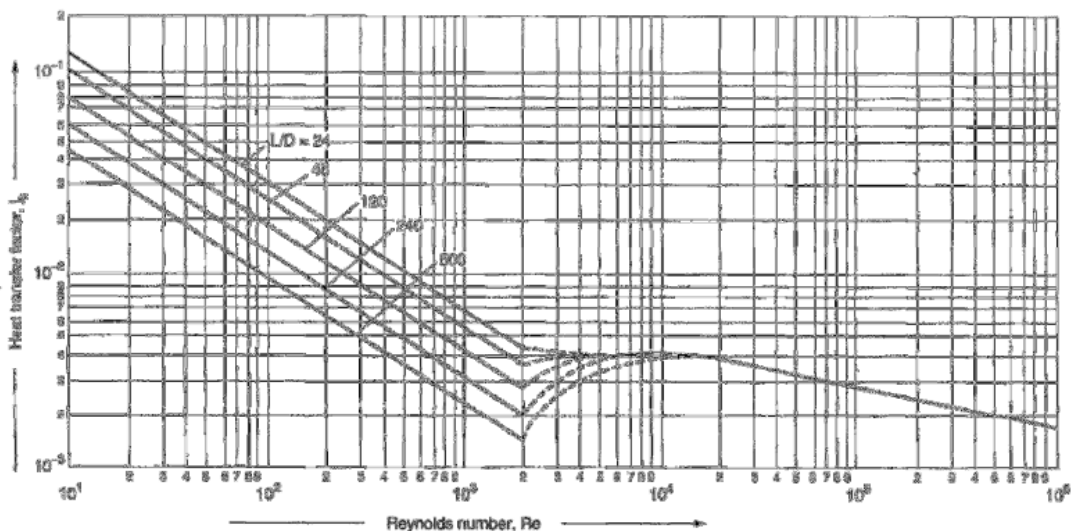
### PERDUA DE CÀRREGA PER TUBS

En primer lloc es calcula la pèrdua de càrrega per tubs a partir del mètode de KERN. Amb aquest mètode només es consideren les pèrdues per fricció i es tindrà en compte la pèrdua de càrrega en un sol tub que es pot estimar utilitzant la següent expressió.

$$\Delta P_t = 8 \cdot j_h \cdot \frac{\rho_t \cdot v_t^2}{2} \cdot \left( \frac{L}{D_i} \right)$$

on:

- $\Delta P_t$  = pèrdua de pressió (bar)
- $j_h$  = factor de fricció, que es calcula mitjançant la figura 12.24 de Coulson (adjunta) a partir del numero de Reynolds.



**Figura 12.6.3.14** Factor de transferència de calor pel costat de tubs a partir del número de Reynolds [Coulson and Richardson's, 3dr Edition, 1999]

- $\rho_t$ = densitat del fluid de mescla ( $\text{Kg}/\text{m}^3$ )
- $v_t$ = velocitat del fluid de mescla ( $\text{m}/\text{s}$ )
- $L$ = longitud dels tubs ( $\text{m}$ )
- $D_i$ = diàmetre intern del tub ( $\text{m}$ )

Pel càlcul del Reynolds es segueix la següent metodologia:

Càlcul de l'àrea de pas d'un tub:

$$A_{pas\ 1\ tub} = \frac{\pi}{4} \cdot D_i^2 = 1,14 \cdot 10^{-3} \text{m}^2$$

on:

- $A_{pas\ 1\ tub}$ = àrea de pas d'un tub ( $\text{m}^2$ )
- $D_i$ = diàmetre intern del tub ( $\text{m}$ )

Càlcul de l'àrea de pas de tots els tubs:

$$A_{pas\ t} = N_t \cdot \frac{A_{pas\ 1\ tub}}{n_{pt}} = 0,36 \text{m}^2$$

on:

- $A_{pas\ t}$ = àrea de pas de tots els tubs ( $\text{m}^2$ )
- $N_t$ = numero de tubs
- $A_{pas\ 1\ tub}$ = àrea de pas d'un tub ( $\text{m}^2$ )

Càlcul del cabal de fluid:

$$G_{tub} = \frac{m_t}{A_{pas\ t}} = 17246,21 \text{kg}/\text{m}^2 \cdot \text{h}$$

on:

- $G_{tub}$ = cabal del fluid per àrea ( $\text{Kg}/\text{h} \cdot \text{m}^2$ )
- $m_t$ = cabal màssic del fluid ( $\text{Kg}/\text{h}$ )
- $A_{pas\ t}$ = àrea de pas de tots els tubs ( $\text{m}^2$ )

Càlcul del Reynolds:

$$Re = \frac{D_i \cdot G_{tub}}{\mu} = 730,08$$

on:

- Re= numero de Reynolds
- $D_i$ = diàmetre intern del tub (m)
- $G_{\text{tub}}$ = cabal del fluid per àrea (Kg/h·m<sup>2</sup>)
- $\mu$ = viscositat de la mescla (Kg/h·m)

Per tant gràficament el valor de  $j_h = 0,0055$

La velocitat del fluid que circula pels tubs és una dada coneguda ja calculada amb les dades de la patent i el seu valor és igual a:

$$v_t = 0,007 \text{ m/s}$$

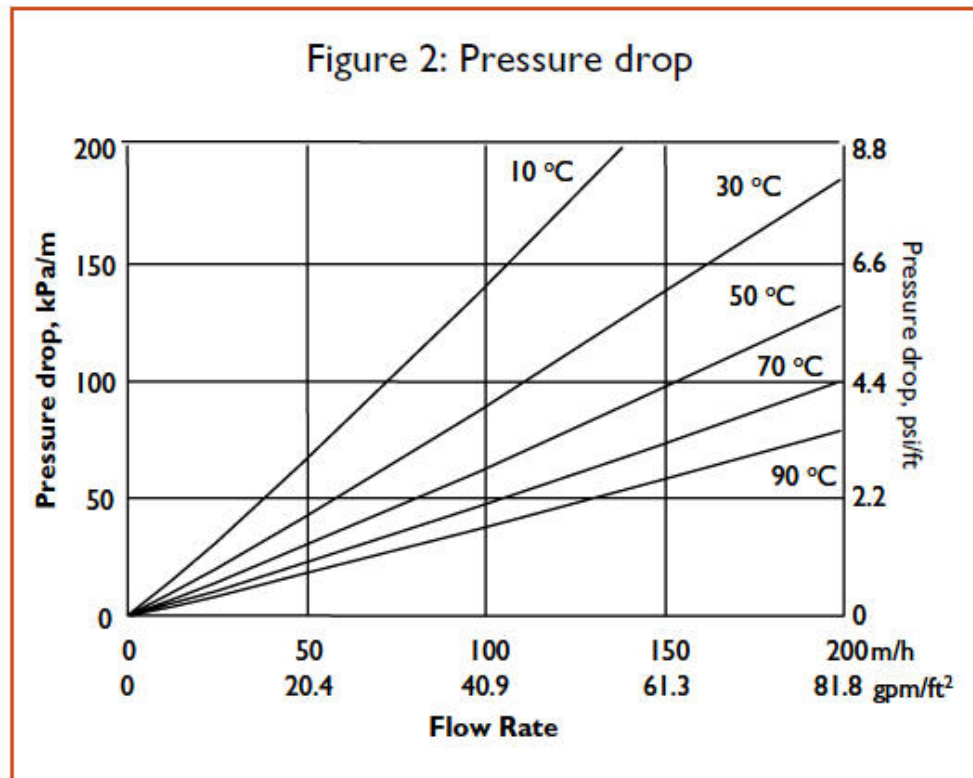
Finalment el valor de la pèrdua de càrrega pel costat de tubs és igual a:

$$\Delta P_t = 8 \cdot j_h \cdot \frac{\rho_t \cdot v_t^2}{2} \cdot \left(\frac{L}{D_i}\right) = 0,12 \text{ Pa} = 0,12 \text{ N/m}^2$$

El valor màxim aconsellable per a líquids amb viscositats més petites de 1cP (fluid de tubs  $\mu=0,25\text{cP}$ ) és de 35 kN/m<sup>2</sup>, en aquest cas el valor és de 0,12 kN/m<sup>2</sup> i per tant la pèrdua de càrrega és menyspreable.

Per conèixer la pèrdua de càrrega que provoca el pas del fluid pel llit catalític s'utilitza la figura següent, un gràfic proporcionat pel distribuïdor de la resina utilitzada on el valor d'aquesta pèrdua de càrrega es pot interpolar si és coneix la velocitat del líquid que circula pel llit catalític i la seva temperatura.





**Figura 12.6.3.15** Pèrdues de càrrega relacionades amb el pas del fluid pel llit catalític d'Amberlyst A-21 en funció de la velocitat i la temperatura d'operació [Rohm and Haas].

La velocitat del fluid és de 25,32m/h i la temperatura d'uns 93°C, amb aquestes dades s'interpolava un valor de pèrdua de càrrega de 10kPa/m.

Si es fa la suma de les dues contribucions de pèrdues de càrrega el resultat és de 10,12kPa valor inferior a la pèrdua de pressió màxima aconsellada per treballar amb líquids que circulen per tubs (35kPa) i per tant és considera acceptable.

### **PÈRDUA DE CÀRREGA PER CARCASSA**

Pel càlcul de la pèrdua de càrrega de la carcassa només es consideren les pèrdues per fricció, aquestes es poden estimar utilitzant la següent expressió.

$$\Delta P_s = 8 \cdot j_F \cdot \frac{\rho_s \cdot v_s^2}{2} \cdot \left( \frac{D_s}{D_{eq}} \right) \cdot \left( \frac{L}{I_B} \right)$$

on:

- $\Delta P_s$  = pèrdua de pressió (bar)
- $j_f$  = factor de fricció, que es calcula mitjançant la figura 12.24 de Coulson a partir del numero de Reynolds.
- $\rho_s$  = densitat de toluè (Kg/m<sup>3</sup>)
- $v_s$  = velocitat del toluè (m/s)
- $L$  = longitud de la carcassa (m)
- $D_s$  = diàmetre intern de carcassa (m)
- $D_{eq}$  = diàmetre equivalent (m)

Pel càlcul del Reynolds seguirem la següent metodologia:

Càlcul del Reynolds:

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

on:

- $Re$  = numero de Reynolds
- $D_{eq}$  = diàmetre equivalent (m)
- $G_s$  = cabal de toluè (Kg/h·m<sup>2</sup>)
- $\mu_s$  = viscositat del toluè (Kg/h·m)

Càlcul del diàmetre equivalent:

$$D_{eq} = \frac{1,10}{D_E} \cdot (\text{pitch}^2 - 0,917 \cdot D_E^2) = 0,039m$$

on:

- $D_{eq}$  = diàmetre equivalent (m)
- $D_E$  = diàmetre exterior tubs (m)
- $\text{pitch} = 1,25 \cdot D_E$  = distància entre els centres de dos tubs consecutius (m)

Càlcul del cabal d'oli:

$$G_s = \frac{M_s}{A_{st}} = 64160.88 \text{ kg/hm}^2$$

on:

- $G_s$  = cabal de toluè (Kg/h·m<sup>2</sup>)
- $M_s$  = cabal màssic de toluè (Kg/h)

- $A_{st}$ = àrea transversal de carcassa ( $m^2$ )

Càlcul de l'àrea transversal de carcassa:

$$A_{st} = \frac{I_B \cdot D_s \cdot (pitch - D_E)}{pitch \cdot n_{ps}} = 0,17$$

on:

- $A_{st}$ = àrea transversal de carcassa ( $m^2$ )
- $I_B$ = espai entre pantalles (m)
- $pitch = 1,25 \cdot D_E$ = distància entre els centres de dos tubs consecutius (m)
- $D_E$ = diàmetre exterior de tubs (m)
- $n_{ps}$ = numero de passos per tubs (1)

Pel càlcul de la velocitat del toluè que circula per carcassa s'utilitzarà la següent formula:

$$v_s = \frac{M_s}{A_{st} \cdot \rho_s} = 0,021m/s$$

on:

- $v_s$ = velocitat del toluè (m/s)
- $M_s$ = cabal màssic de toluè (Kg/s)
- $\rho_s$ = densitat de l'oli ( $Kg/m^3$ )
- $A_{st}$ = àrea transversal de la carcassa ( $m^2$ )

Finalment el valor del Reynolds és:

$$Re = \frac{D_{eq} \cdot G_s}{\mu_s} = 2.780 \text{ TURBOLENT}$$

A aquest valor li correspon un  $j_f = 0,09$ .

El valor de la pèrdua de càrrega per carcassa:

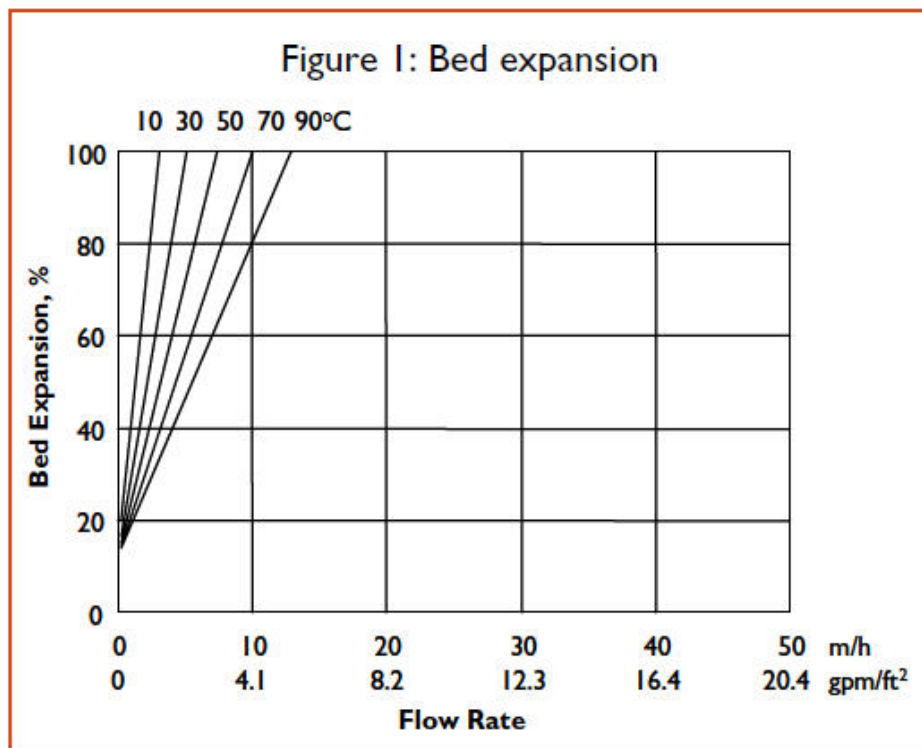
$$\Delta P_s = 8 \cdot j_f \cdot \frac{\rho_s \cdot v_s^2}{2} \cdot \left( \frac{D_s}{D_{eq}} \right) \cdot \left( \frac{L}{I_B} \right) = 42Pa = 42N/m^2$$

El valor màxim aconsellable per a líquids és de  $50kN/m^2$ , en aquest cas el valor és de  $0,042 kN/m^2$  i per tant la pèrdua de càrrega és menyspreable igual que en el cas de tubs.

### FLUÏDITZACIÓ DEL LLIT CATALÍTIC

Si la velocitat a la que circula el líquid per els tubs plens de resina és massa elevada el llit, considerat fix, pot arribar a fluiditzar-se fent que canviï el procés de reacció que s'ha dissenyat, és per això que, de la mateixa manera que és important tenir en compte les pèrdues de càrrega, és important saber si el llit es pot fluiditzar en les condicions de treball.

La figura següent proporcionada pel fabricant de la resina utilitzada, Amberlyst A-21, permet trobar el tant per cent d'expansió del llit segons la temperatura i la velocitat del fluid amb la que es treballa.



*Figura 12.6.3.16 Percentatge d'expansió del llit catalític format per Amberlyst A-21 segons la velocitat i temperatura del fluid que hi circula [Rohm and Haas].*

La velocitat del fluid és de 25,32m/h i la temperatura d'uns 93°C, amb aquestes dades s'interpolava un valor del percentatge d'expansió del llit catalític superior al 100%, és per això que s'ha d'incorporar en els tubs una reixeta que actuï com a límit físic per tal de que aquest no es fluiditzi.

## 12.7 DISSENY DE LES COLUMNES DE SEPARACIÓ

### 12.7.1 Introducció

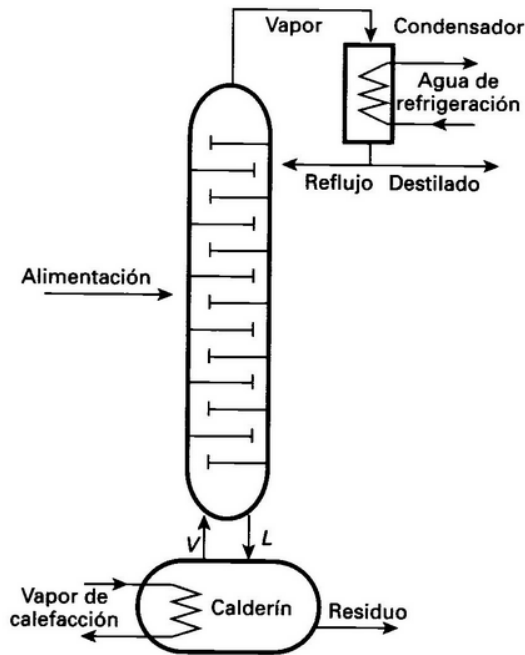
#### **Columnes de destil·lació**

La destil·lació és la tècnica de separació més comú en la indústria de processos químics; amb aquest procés es realitzen del 90 al 95 % de les separacions en la indústria. Aquesta permet separar mescles de substàncies que tenen diferents punts d'ebullició.

La destil·lació consisteix en escalfar la mescla fins al seu punt d'ebullició, moment en el que els vapors en equilibri amb el líquid s'enriqueixen en el component més volàtil. Aquests vapors passen a un condensador que els refreda i els passa a estat líquid. D'aquesta manera s'obté un líquid ric en el component més volàtil i un líquid enriquit en el component menys volàtil.

La destil·lació pot ser simple, on el cicle d'evaporació-condensació només es realitza una vegada, o fraccionada, que es basa en realitzar varies vegades el cicle. La destil·lació fraccionada és molt més eficient que la simple i permet separar substàncies amb punts d'ebullició més pròxims.

Sovint, l'operació d'una unitat de separació no condueix al producte de puresa desitjada, per lo que sovint es proposa l'operació en múltiples etapes d'equilibri. L'augment d'etapes condueix a una puresa més gran a costa d'obtenir petites quantitats de producte. L'equip utilitzat en la pràctica és un columna de plats, com la que es mostra a la figura 12.7.1.1, constituïda per un conjunt de plats (o etapes) amb contacte vapor-líquid a cadascuna d'elles.



**Figura 12.7.1.1.** Esquema general d'una columna de destil·lació per plats.

Les columnes de destil·lació normalment en recipients cilíndrics i verticals que tenen en el seu interior plats; que permet afavorir el contacte entre la fase vapor i líquida, que circula en contracorrent. Una alternativa a aquestes columnes és substituir els plats per un rebliment, que també millora el contacte entre el líquid i el vapor.

Aquestes columnes estan compostes per un condensador i un reboiler. El condensador refreda el vapor i millora l'eficàcia de la destil·lació, el líquid resultant es divideix en dues fraccions, una és el producte que s'extreu per caps en la columna i l'altre, anomenada reflux, es recircula a la columna i manté el flux descendent a través d'aquesta, obtenint el contacte requerit amb la fase vapor ascendent en cada etapa d'equilibri líquid-vapor. El condensador pot ser total, quan tot el vapor es completament condensat, o parcial, on només una fracció és condensada.

El reboiler transfereix calor al líquid que emergeix de l'etapa d'equilibri corresponent a les cues de la columna per vaporitzar-lo parcialment, de manera que aquest vapor es recirculat a la columna i es manté el flux ascendent a través d'aquesta.

### Columnes d'absorció

L'absorció és una operació unitària basada en la separació de un o més components d'una mescla gasosa amb l'ajuda d'un solvent líquid mitjançant un procés de transferència de matèria. Les operacions d'absorció, com la destil·lació, es duen a terme en columnes de plats o rebliment per tal de afavorir el contacte entre les dues fases, augmentant el rendiment de l'operació. La diferencia de concentració entre les dues fases és la força impulsora, per tant, quan la concentració del component a la fase líquida sigui zero la transferència serà màxima.

Normalment, per tal d'afavorir el contacte entre les dues fases, el líquid és distribuït per la part superior i el gas per la part inferior, tal com es mostra a la figura 12.7.1.2. Les columnes d'absorció poden ser de plats, encara que normalment són de rebliment.

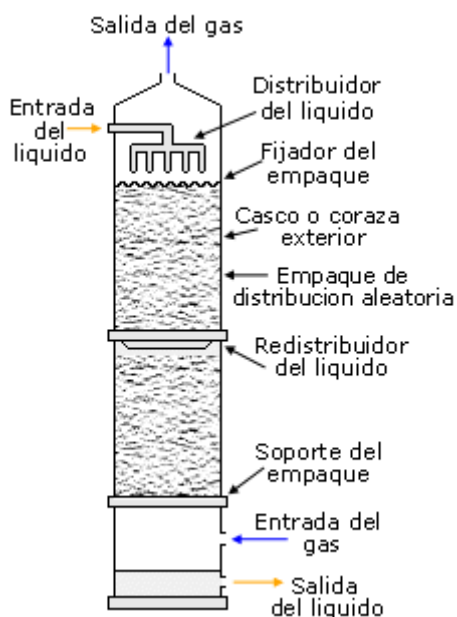


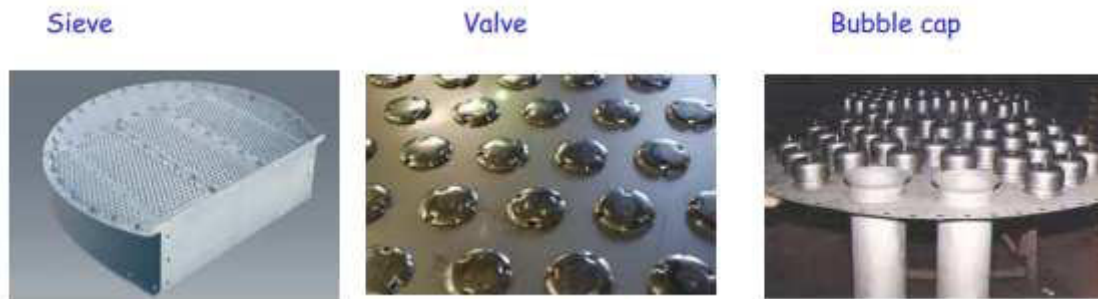
Figura 12.7.1.2 Esquema general d'una columna d'absorció.

#### 12.7.1.1 Tipus de columnes

Les columnes de destil·lació i les columnes de rebliment poden ser de plats o de rebliment. L'objectiu d'ambdós dispositius és afavorir el contacte entre les fases vapor i líquid.

### **Columnes de plats**

El tipus més comú de columnes de plats són les de plats circulars (bubble cap), de plats de vàlvules (valve tray) i les de plats d'orificis (sieve tray). A la figura 12.7.1.3 es presenten els diferents tipus de plats.



*Figura 12.7.1.3. Diferents tipus de plats utilitzats en columnes de destil·lació i absorció.*

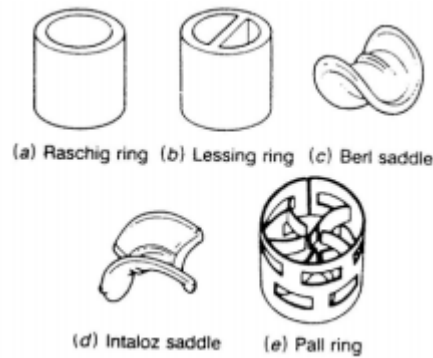
Els plats han de ser capaços de tractar les quantitats requerides de líquid i vapor sense inundació o arrossegament excessiu. També és important que la caiguda de pressió en el plat no sigui gaire alta i resulti simple d'instal·lar. El número de plats ve determinat per l'operació, si la quantitat de plats és més alta, la separació serà més gran. El tipus de plat més utilitzat és el plat d'orificis degut al seu bon funcionament en relació amb el seu preu.

### **Columnes de rebliment**

En les columnes de rebliment la transferència de matèria es realitza de forma continuada, formada per una carcassa cilíndrica que conté un material inert en el seu interior, anomenat rebliment.

Els rebliments han de ser químicament inerts, tenir una resistència mecànica elevada i permetre el pas dels corrents amb un bon contacte entre les fases. A la figura 12.7.1.3 es presenten els diferents tipus de rebliments més comuns.





**Figura 12.7.1.3.** Tipus de rebliments més comuns.

### 12.7.1.2 Comparació entre les columnes de plats i rebliment

A continuació es presenten diferents situacions on es preferible utilitzar cada columna:

- Si el flux de líquid és petit comparat amb el del gas és preferible utilitzar columnes de plats.
- Per evitar el taponament, es preferible utilitzar les columnes de plats.
- Les columnes de plats poden tractar un cabal més ampli sense inundació.
- Si els líquids tenen sòlids en suspensió és preferible la torre de plats degut a la seva facilitat de neteja.
- Si hi ha grans canvis de temperatura és preferible una torre de plats, ja que l'increment de temperatura pot deteriorar el rebliment.
- Per diàmetres majors a 0,6 metres es recomana la columna de plats. Per diàmetres menors a 1,2 metres es recomana la columna empacada. Per tant, quan la columna té un diàmetre entre 0,6 i 1,2 metres ambdues columnes són vàlides.
- Les columnes de rebliment són més fàcils de construir i més barates si es treballa amb fluids corrosius.
- Per fluids tòxics o inflamables es preferible utilitzar la columna de rebliment.
- Si es tenen líquids amb tendència a formar escuma s'han d'utilitzar torres de rebliment.
- L'emmagatzemat de líquid és inferior en les torres de rebliment.
- Les torres de rebliment tenen menor pèrdua de càrrega que les de plats.

### 12.7.1.3 Descripció del procés de càlcul

Per al disseny d'aquests equips de separació s'han utilitzat mètodes teòrics i el simulador de processos químics AspenTech "Hysys v 7.3".

Degut a l'existència de recirculacions de corrents i a que els rendiments de separació d'aquests equips està estretament lligat al cabal i composició del corrent d'entrada, no es pot realitzar el disseny de cada columna per separat, ja que l'eficiència de cada columna modifica el cabal d'entrada de les altres. Per solucionar-ho, s'ha implementat el balanç de matèria de tota la planta en una fulla Excel i s'han deixat tots els corrents de sortida de les columnes en funció del rendiment per cada compost en cada columna, donat pel Hysys.

S'ha realitzat un procés iteratiu que comença amb la suposició d'una eficiència de separació per cada equip i component en el balanç de matèria per obtenir un primer valor de cabal i composició dels corrents d'entrada als equips, aquests valors són els que s'introdueixen al Hysys per a la primera iteració i s'obtenen uns nous valors de eficiència de separació per cada component, es comparen aquests valors amb els suposats, si aquests no són iguals fins a la segona xifra decimal es torna a realitzar el càlcul del balanç de matèria amb els nous valors obtinguts de les eficiències d'eliminació obtenint d'aquesta manera els cabals per a la pròxima simulació amb el Hysys. Es repeteix el procés fins que els valors d'eficiències d'eliminació de l'última iteració són igual al de la iteració anterior.

#### 12.7.1.4 Decisió del paquet de propietats

Abans de realitzar qualsevol disseny, s'ha de decidir quina equació d'estat o model d'activitat es farà servir per definir l'equilibri de fases de la mescla en totes les columnes. Una bona elecció del paquet de propietats és essencial alhora de fer un bon disseny, ja que tot el disseny posterior depèn d'aquest. El millor paquet depèn de les propietats de la mescla, com la polaritat o la pressió. Per escollir el paquet es fa servir l'escrit "*Don't Gamble With Physical Properties For Simulations*". Aquest escrit es basa en una sèrie d'esquemes que diuen quin paquet utilitzar segons les propietats de la mescla.

A partir d'aquests esquemes i considerant les propietats de les diferents mescles a utilitzar en cada columna s'arriba a la conclusió que la millor opció és utilitzar el paquet NRTL pel líquid i Peng-Robinson pel vapor.

## 12.7.2 Columna d'absorció AB-301

Per al disseny de la columna d'absorció AB-301 s'ha utilitzat el simulador de processos químics AspenTech "Hysys v 7.3". En el cas del càlcul del diàmetre de la columna es compara el resultat obtingut pel Hysys amb el mètode teòric que utilitza el gràfic d'Eckert.

### 12.7.2.1 Disseny funcional

La finalitat de la columna d'absorció AB-301 és la de separar el MCC del corrent gasos que surt del reactor R-301, mitjançant la seva absorció en toluè. El foscè i l'HCl sortiran en fase gas per caps.

La dades que requereix el subprograma per funcionar són les següents:

- Cabal i composició del corrent d'entrada
- Número d'etapes d'equilibri
- Pressió per caps i cues
- Temperatura aproximada per caps i cues

Es defineixen els corrents d'entrada gas i líquid mitjançant el balanç de matèria, se suposa que la temperatura d'entrada de la mescla gasosa és de 260°C, corresponent a la temperatura de sortida del primer reactor. La temperatura d'entrada del corrent líquid ric en toluè és de 4°C, que és la que es considera òptima per a refredar la mescla i poder absorbir el MCC.

S'introdueixen els corrents en l'absorbidor i es considera una pressió de sortida per als dos corrents de 1 atmosfera. S'introdueixen totes les dades i el Hysys resol la columna de manera rigorosa; en cas que la separació no sigui la desitjada es passa a modificar els paràmetres de la columna, com el número de plats o el cabal de dissolvent. A la figura 12.7.2.1 es presenta l'esquema general utilitzat en el Hysys per realitzar el disseny de la columna d'absorció AB-301.

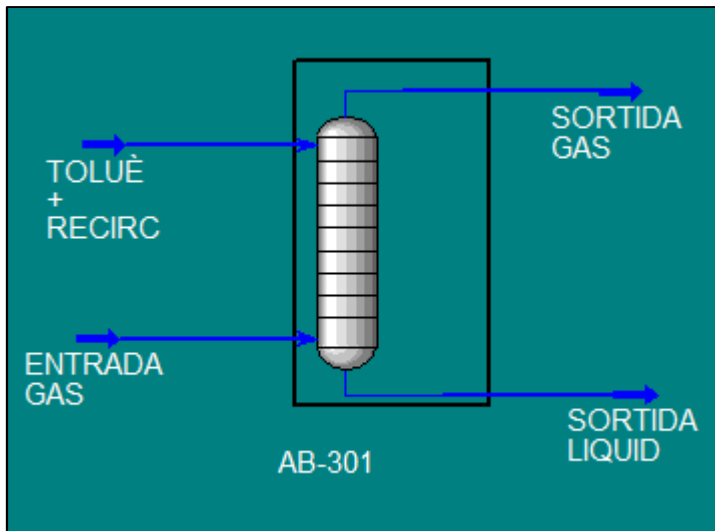


Figura 12.7.2.1. Esquema general de la columna d'absorció AB-301 en el Hysys.

A la figura 12.7.2.2 es presenta la pantalla principal del disseny realitzat amb el Hysys amb el subprograma "Absorber".

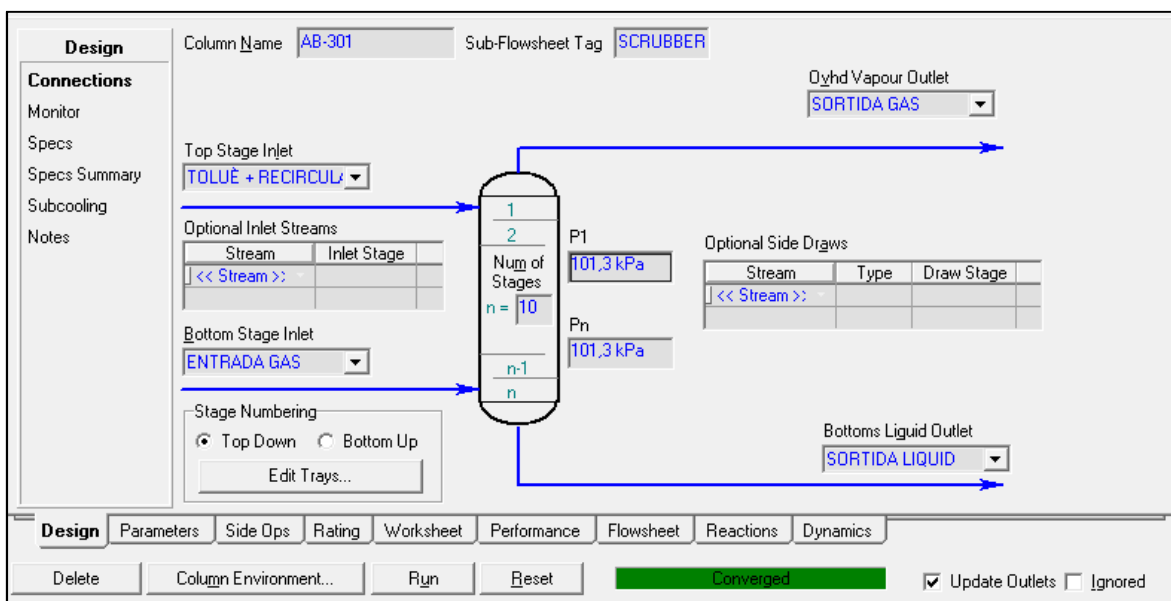


Figura 12.7.2.2. Pàgina principal del disseny de la columna d'absorció AB-301.

Si el disseny de la columna és correcte i el Hysys ha trobat una solució, s'observa una icona en verd on diu "Converged". Per complir l'objectiu per al que s'ha dissenyat la columna es requereixen 10 etapes d'equilibri.

A les taules següents es presenten les condicions de treball i les composicions dels corrents respectivament, per tant, el balanç de matèria a la columna AB-301.

**Taula 12.7.2.1.** *Condicions de treball a la columna d'absorció AB-301. Balanç de matèria.*

Corrent	Entrada toluè	Entrada gas	Sortida gas	Sortida líquid
<b>Fració vapor</b>	0,00	1,00	1,00	0,00
<b>Temperatura ( °C)</b>	4,00	260,00	82,18	89,26
<b>Pressió (Kpa)</b>	101,30	101,30	101,30	101,30
<b>Cabal molar (Kmol/h)</b>	26,59	19,30	18,82	27,07
<b>Cabal màssic (Kg/h)</b>	2437,00	1327,00	1263,00	2501,00
<b>Cabal de líquid (m/h)</b>	2,83	1,63	1,39	3,07
<b>Entalpia molar (KJ/Kmol)</b>	-2344,00	-116600,00	-51100,00	-49890,00
<b>Entropia molar</b>	-137,20	282,70	135,90	18,95
<b>Flux de calor (KJ/h)</b>	-62330,00	-250000,00	-962000,00	-1350000,00

**Taula 12.7.2.2** *Composicions dels cabals a la columna d'absorció AB-301.*

Corrent	Entrada toluè	Entrada gas	Sortida gas	Sortida líquid
<b>MCC</b>	0,0494	0,4444	0,0512	0,3299
<b>HCl</b>	0,0103	0,4444	0,4635	0,0047
<b>MIC</b>	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
<b>Toluè</b>	0,9402	0,0000	0,3827	0,6574
<b>Fosgè</b>	0,0001	0,1111	0,1025	0,0080
<b>1-naftol</b>	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
<b>Carbaril</b>	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Com es pot observar, la majoria del MCC queda absorbit en toluè i surt en forma líquida. També es veu com la majoria del fosgè i de l'àcid clorhídric surt per caps en forma gasosa.

Una vegada dissenyada la columna, el programa Hysys permet obtenir diferents gràfics, com temperatura, caudal i composició en funció de l'etapa d'equilibri. Aquests es presenten als gràfics següents:

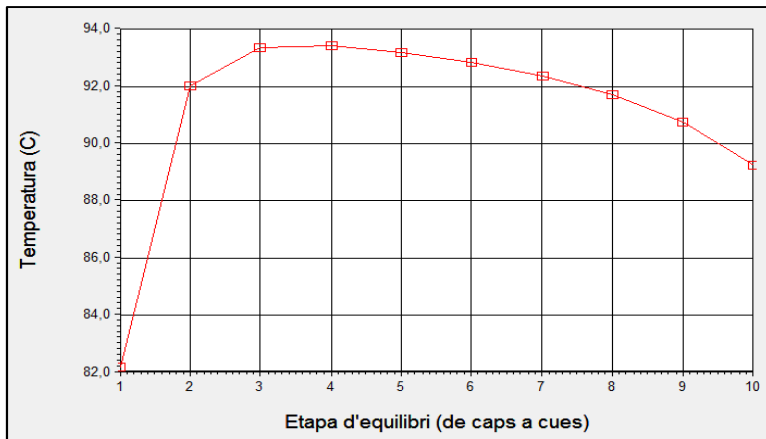


Figura 12.7.2.3. Temperatura en funció del número d'etapa d'equilibri a la columna d'absorció AB-301.

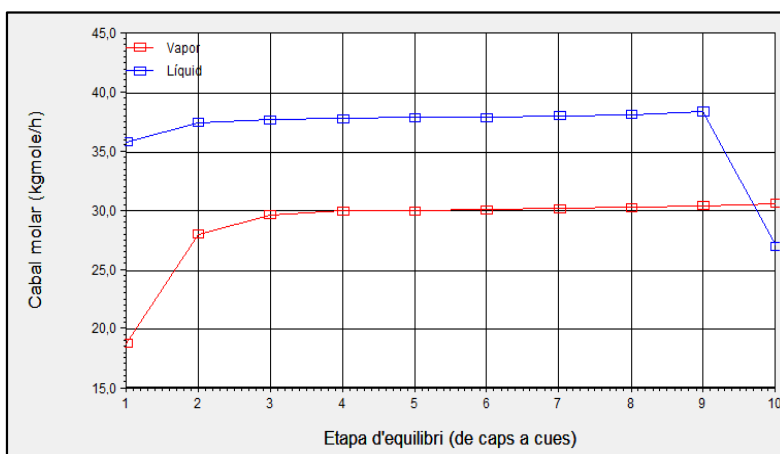


Figura 12.7.2.4. Cabal molar del vapor i del líquid en funció del número d'etapa d'equilibri a la columna d'absorció AB-301.

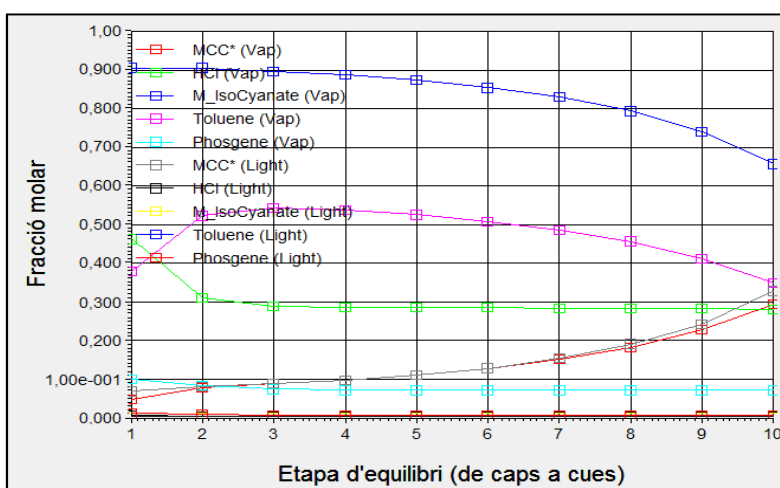


Figura 12.7.2.5 Composició dels diferents components en funció del número d'etapa d'equilibri a la columna d'absorció AB-301.

### 12.7.2.2 Dimensionat

Una vegada realitzats tots els càlculs es realitza el dimensionat de la columna. Per defecte, el mètode rigorós treballa amb un diàmetre de 1,5 metres. Com a espai entre plats ha calculat 0,55 metres, un número lògic en les columnes de rectificació. Per realitzar un dimensionat més acurat, el Hysys conté una aplicació anomenada “Tray Sizing”.

Aquesta aplicació permet calcular el diàmetre i alçada de la columna tant si es fa de plats com si es fa de rebliment. En aquest cas, és preferible utilitzar la columna de rebliment, ja que el diàmetre calculat segons el “Tray sizing” és de 0,6096 metres. A més, les columnes de rebliment són més barates i treballen millor amb fluids corrosius.

El Hysys permet escollir el tipus de rebliment i el material. Se sap que a mesura que el diàmetre del rebliment és més gran l'alçada de la columna augmenta. El material més adequat per la columna i el rebliment és el HASTELLOY® alloy B-2, ja que permet treballar amb compostos corrosius, com en el cas de la columna AB-301. Com que el Hysys no conté aquest compost a la seva base de dades, s'agafa rebliment de metall. Es decideix utilitzar Pall Rings i s'escull la seva mida segons la taula 12.7.2.3.

**Taula 12.7.2.3** Mida del rebliment Pall Rings segons el diàmetre de la columna.

Mida del rebliment	Diàmetre de la columna (m)
1/2" - 5/8"	0,1524 - 0,3048
5/8" - 1"	0,3048 - 0,4572
1" - 1 <sup>1/2</sup> "	0,4572 - 0,6096
1 <sup>1/2</sup> " - 2"	0,6096 - 1,2192
2" - 3"	>1,2192

Es decideix utilitzar Pall Rings d'un diàmetre i mig de polzada distribuït de manera aleatòria. A la figura 12.7.2.6 es presenta el rebliment utilitzat en la columna AB-301.



**Figura 12.7.2.6** Rebliment utilitzat en la columna AB-301. Pall Ring.

A la taula 12.7.2.4 es presenten els paràmetres del disseny del Hysys per la columna AB-301.

**Taula 12.7.2.4.** Paràmetres de disseny del Hysys del dimensionat de la columna AB-301.

<b>Elements interns de la columna</b>	
Tipus de rebliment	Pall Rings de metall (1 ½ polzades)
Correlació inundació	SLEv73
Correlació HETP	Norton
Número de peces de rebliment	19631
Pes del rebliment (Kg)	626,7
Estimació del cost del rebliment (\$)	688,6
<b>Geometria de la columna</b>	
Diàmetre (m)	0,6096
Àrea transversal (m <sup>2</sup> )	0,2919
Alçada del rebliment (m)	5,174
<b>Resultats hidràulics</b>	
Inundació màxima (%)	39,96
Pèrdua de càrrega (Kpa)	0,5217
Pèrdua de càrrega per metre de rebliment	0,1008
Velocitat del gas (m <sup>3</sup> /h·m <sup>2</sup> )	7060
Velocitat del gas (m/s)	1,961

Per comprovar els resultats obtinguts amb el Hysys, es calcula el diàmetre de la columna obtingut mitjançant el mètode teòric que utilitza el gràfic d'Eckert, presentat a la figura 12.7.2.7.



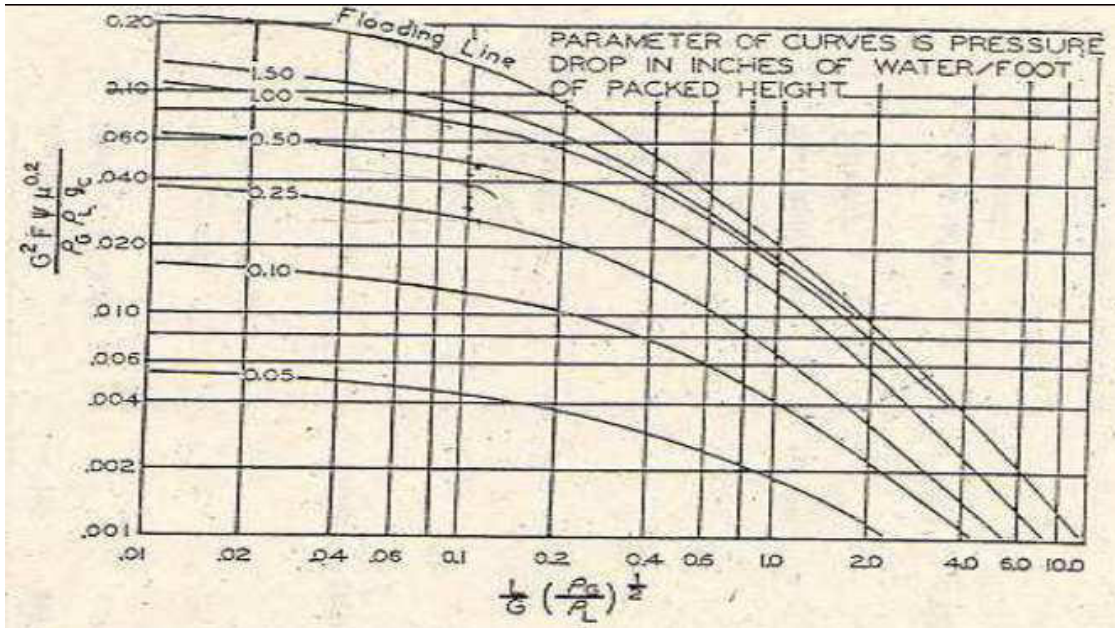


Figura 12.7.2.7. Gràfic d'Eckert

Per poder trobar el diàmetre, primerament es troba el valor de l'eix de les abscisses, definit per l'equació 12.7.2.1.

$$\frac{L}{G} \cdot \left( \frac{\rho_G}{\rho_L} \right)^{1/2} \quad \text{Equació 12.7.2.1}$$

on,

L: cabal total de líquid (kmols/h)

G: cabal total de gas (kmols/h)

$\rho_G$ : densitat del gas (lb/ft<sup>3</sup>)

$\rho_L$ : densitat del líquid (lb/ft<sup>3</sup>)

Com que el cabals de líquid i de gas no són constants en la columna, es calcula el diàmetre en dos parts, la superior i la inferior, utilitzant els paràmetres donats pel Hysys. A la taula següent es presenten els paràmetres de l'equació 12.7.2.2 utilitzats per cada zona on es calcula el diàmetre.

Taula 12.7.2.5 Paràmetres de l'equació 12.7.2.1 utilitzats per cada zona on es calcula el diàmetre.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR
L (kmols/h)	35,829	27,072
G (kmols/h)	28,063	19,301
$\rho_G$ (lb/ft <sup>3</sup> )	0,161	0,099
$\rho_L$ (lb/ft <sup>3</sup> )	50,060	46,820

A la taula 12.7.2.6 es presenta el valor de les abscisses per les dues zones calculades amb els valors dels paràmetres de la taula 12.7.2.5.

**Taula 12.7.2.6** Valor de les abscisses pel gràfic d'Eckert.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR
Valor abscisses (Eckert)	0,0723	0,0644

Considerant que la columna treballa a un 50% de la seva velocitat d'inundació s'arriba a una valor de l'eix d'ordenades, i mitjançant l'equació 12.7.2.2 es calcula el valor del cabal del gas en unitats de cabal dividides per l'àrea de pas, que permet obtenir aquesta última.

**Taula 12.7.2.7** Valor de les ordenades pel gràfic d'Eckert.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR
Valor d'ordenades (Eckert)	0,0500	0,0550

Mitjançant l'equació 12.7.2.2 es pot calcular el valor de G per cada zona.

$$\frac{G^2 \cdot F \cdot \varphi \cdot \mu^{0,2}}{\rho_G \cdot \rho_L \cdot g_C} \quad \text{Equació 12.7.2.2}$$

on:

G: flux de gas (lb/s·ft<sup>2</sup>)

F: factor d'ompliment

$\varphi$  : relació entre la densitat de l'aigua i la del líquid

$\mu$ : viscositat del líquid (cP)

$g_C$ : constant de gravetat (32lb·ft/lb<sub>f</sub>·s<sup>2</sup>)

Mitjançant l'equació 12.7.2.3 es pot calcular el valor de l'àrea de la columna, amb la que es pot obtenir el diàmetre per cada zona, com es presenta a la taula 12.7.2.8.

$$A = \frac{G \left( \frac{\text{lb}}{\text{s}} \right)}{G \left( \frac{\text{lb}}{\text{s} \cdot \text{ft}^2} \right)} \quad \text{Equació 12.7.2.3}$$

**Taula 12.7.2.8** Paràmetres necessaris per al càlcul del diàmetre de la columna AB-301. Valor del diàmetre trobat per a les dues zones.

	PART SUPERIOR	PART
F	28,000	28,000
$\varphi$	1,247	1,333
$\mu$ (cP)	0,300	0,265
$\rho_G$ (lb/ft <sup>3</sup> )	0,161	0,099
$\rho_L$ (lb/ft <sup>3</sup> )	50,060	46,820
$g_c$ (lb·ft/lbf·s <sup>2</sup> )	32,000	32,000
G (lb/s·ft <sup>2</sup> )	0,685	0,533
G (lb/hr)	4669	2926
A (ft <sup>2</sup> )	1,895	1,526
<b>D (m)</b>	<b>0,466</b>	<b>0,418</b>

Es compara el valor del diàmetre obtingut per les dues zones de manera teòrica i amb el Hysys a la taula 12.7.2.9. Com a valor final, s'agafa el del Hysys ja que és el diàmetre més gran i, per tant, el més conservatiu.

**Taula 12.7.2.9** Valors del diàmetre de la columna AB-301 obtinguts per les dues zones pel mètode teòric i amb el Hysys.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR	HYSYS
<b>D (m)</b>	<b>0,466</b>	<b>0,418</b>	<b>0,6096</b>

La columna d'absorció AB-301 s'ha dissenyat a través del programa Hysys, que utilitza dades teòriques que té a la seva base de dades. A l'hora de construir la columna, és aconsellable treballar amb un marge de seguretat, consistent en realitzar un sobredimensionat de la columna, per tal d'obtenir la separació desitjada en cas que el seu comportament fos diferent al teòric. L'eficiència de separació està directament relacionada amb l'alçada de rebliment a la columna, per tant el sobredimensionament ve donat per una augment en l'alçada del rebliment. Pel cas de les columnes, es decideix sobredimensionar en un 25% sobre l'alçada de rebliment, tal com s'indica a continuació.

$$h \text{ rebliment} = h \text{ rebliment Hysys} \cdot 1,25 = 5,174 \text{ m} \cdot 1,25 = \mathbf{6,468 \text{ m}}$$

S'ha de tenir en compte que al augmentar l'alçada de rebliment, la pèrdua de càrrega serà més gran. El Hysys dona la pèrdua de càrrega en funció de l'alçada, per tant es pot realitzar el càlcul considerant l'alçada sobredimensionada.

$$0,1008 \text{ KPa/m} \cdot 6,468 \text{ m} = \mathbf{0,652 \text{ KPa}}$$

Altra paràmetre que varia és el nombre de peces i el pes d'aquestes. Per poder adaptar-ho a l'alçada sobredimensionada s'utilitza l'alçada antiga, juntament amb el pes i el nombre de peces donades pel Hysys, tal com s'indica a continuació.

$$19631 \text{ peces} \cdot \frac{6,468 \text{ m}}{5,174 \text{ m}} = \mathbf{24541 \text{ peces}}$$

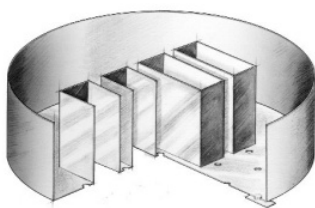
$$626,7 \text{ Kg peces} \cdot \frac{6,468 \text{ m}}{5,174 \text{ m}} = \mathbf{783 \text{ Kg peces}}$$

### 12.7.2.3 Disseny mecànic

L'alçada de la columna d'absorció no només ve donada per l'alçada necessària de rebliment, sinó que s'han de tenir en compte altres factors com l'espai superior i inferior necessari o el suport per al rebliment. A més, es divideix el rebliment en dos zones separades per un redistribuïdor, que permet millorar el funcionament de la torre. La divisió en dos zones també evita la compactació i la formació de camins preferencials.

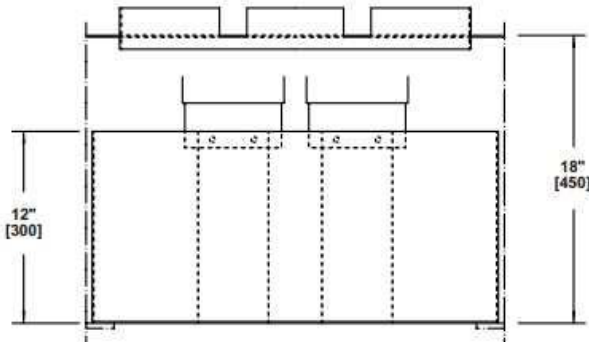
A continuació es detallen els diferents elements que contindrà la columna al seu interior que no s'han tingut en compte en el disseny amb el Hysys, per fer-ho s'utilitza la guia donada per la casa "Saint-Gobain Norpro":

- **Distribuïdor de líquid** a la part superior: aquest permet distribuir el líquid d'entrada de la columna i que quedi distribuït de manera homogènia. S'escull un distribuïdor de tipus graella, presentat a la figura 12.7.2.8, ja que segons la casa "Saint-Gobain Norpro" és el més adequat pel diàmetre de la columna AB-301.



**Figura 12.7.2.8.** Distribuïdor de líquid de graella utilitzat a la columna AB-301

L'alçada del distribuïdor es de 450 mm, tal com es presenta a la figura 12.7.2.9 extreta de la guia del distribuïdor.



**Figura 12.7.2.9** Esquema del distribuïdor de líquid de graella utilitzar en la columna AB-301.

- **Redistribuïdor de líquid** a la part intermèdia: aquest permet distribuir el líquid de manera homogènia a la part inferior. S'utilitza el mateix redistribuïdor que el distribuïdor superior, ja que segons la casa "Saint-Gobain Norpro" es pot fer servir també per a la redistribució del líquid sota el rebliment superior.
- **Reixetes de suport:** per poder suportar l'empaquetament de les dues zones. El tipus de reixeta de suport és funció de diferents factors crítics de disseny. En primer lloc, la placa ha de poder aguantar físicament el rebliment, i en segon lloc el percentatge d'àrea lliure ha de permetre la circulació sense restricció pel líquid i pel gas. Per últim, ha de ser fàcil d'instal·lar. Hi ha diferents criteris per la selecció de la placa de suport:
  - Tipus de rebliment: aleatori o estructurat
  - Característiques del procés (corrosió, temperatura...)
  - Carrega màxima de disseny

La taula 12.7.2.10 permet escollir el tipus de suport segons les característiques de la columna, tal com indica la casa "Saint-Gobain Norpro".

**Taula 12.7.2.10.** Selecció del suport segons les característiques de la columna.

SELECTING A SUPPORT PLATE			
Model Number	Tower ID in. [mm]	Type Packing Supported	Construction Material
818	< 48 [1200]	Any Random	Metals and Thermoplastics
809	< 35.25 [890]	Random (light)	Metals
804	> 36 [900]	Any Random	Metals and Thermoplastics
819	< 48 [1200]	Random (except ceramic)	FRP
1019	> 48 [1200]	Random (except ceramic)	FRP
134	Any	Structured	Metal
Contact your local Saint-Gobain NorPro representative for applications outside the "standards" shown in this brochure.			

Segons les característiques de la columna AB-301, s'escull el suport 818, ja que permet treballar amb rebliment metàl·lic desordenat i amb una columna de diàmetre de 609,6 mm. A la figura 12.7.2.10 es presenta el suport escollit.

**Figura 12.7.2.10.** Suport 818 utilitzat en la columna AB-301.

S'utilitzen dos suports, un pel rebliment inferior i un altre pel superior. L'alçada de cada suport és 114 mm, tal com indica la figura 12.7.2.11 extreta de la guia del proveïdor.

**Figura 12.7.2.11** Esquema del suport utilitzat en la columna AB-301.

- **Limitadors de rebliment:** per al rebliment de metall i plàstic repartit de manera aleatòria es recomana la utilització de limitadors de rebliment quan es treballa amb cabals de vapor que poden arribar a fluiditzar el llit. Aquests es col·loquen a la part superior del rebliment. S'utilitza la taula 12.7.2.11 per tal de determinar la necessitat d'utilitzar limitadors de rebliment en la columna, tal com indica la casa "Saint-Gobain Norpro".

**Taula 12.7.2.11.** Determinació de la necessitat d'utilitzar limitadors de rebliment en la columna.

APPROXIMATE POINT OF FLUIDIZATION					
Packing Wt. (lbs/ft <sup>3</sup> )	5	10	15	20	25
$\Delta P$ (in. WC/ft)	0.96	1.92	2.9*	3.8*	4.8*
*Pressure drop is difficult to predict in flood.					

La variació de pressió en la columna és de 0,123 in. WC/ft i la densitat del rebliment de 25,727 lbs/ft<sup>3</sup>, per tant, no és necessari utilitzar limitadors de rebliment en la columna.

- **Boques d'home:** aquestes serveixen per poder introduir les sondes i per poder accedir en cas de fer algun tipus de manteniment. El diàmetre d'aquestes és de 500 mm de diàmetre.

Hi hauran cinc boques d'home, distribuïdes de la següent manera:

- A la part superior, sobre el distribuïdor de líquid.
- A la part superior, entre el distribuïdor i el rebliment.
- A la part central, entre les dues zones de rebliment.
- A la part central, entre el distribuïdor i el rebliment.
- A la part inferior, entre l'aliment vapor recirculat i el suport del rebliment inferior

Cal tenir en compte l'espai necessari que s'ha de deixar en la part inferior de la columna, entre les dues zones de rebliment i en la part superior; a més, cal deixar un espai entre els distribuïdors i els rebliments. Aquests espais depenen de la zona de treball, tal com s'indica a continuació:

- 1 metre entre el distribuïdor superior i el capçal superior.
- 0,75 metres per sota del distribuïdor superior.
- 1 metre entre les dues zones de rebliment.
- 0,75 metres per sota del distribuïdor inferior.
- 2 metres entre el suport de rebliment inferior i el capçal inferior.

Per tant, es pot calcular l'alçada total del cos de la columna, tal com s'indica a continuació:

$$\begin{aligned}
 h_{cos} &= h_{espai superior} + h_{distribuïdor} + h_{espai dist-rebl} + \\
 &h_{rebliment superior} + h_{suport} + h_{espai intermedi} + h_{redistribuïdor} \\
 &+ h_{espai dist-rebl} + h_{rebliment inferior} + h_{suport} + h_{espai inferior} = \\
 &= 1000 \text{ mm} + 450 \text{ mm} + 750 \text{ mm} + 3234 \text{ mm} + 114 \text{ mm} + 1000 \text{ mm} + \\
 &+ 450 \text{ mm} + 750 \text{ mm} + 3234 \text{ mm} + 114 \text{ mm} + 2000 \text{ mm} = 13096 \text{ mm}
 \end{aligned}$$

Per tal d'abaratir costos es decideix fer la columna de 13 metres, ja que serà més fàcil i econòmic trobar un proveïdor que vengui la xapa d'aquesta longitud i no de 13,098 m. La longitud que falta es treu a la dels espais buits superior per sobre del distribuïdor, intermedi per sobre del redistribuïdor i inferior sota del limitador, ja que això no afectarà al funcionament de la columna. S'obté un espai de 968 mm pel superior i intermedi i 1968 mm per l'inferior.

A continuació es dissenya la columna d'absorció AB-301 mitjançant el codi ASME, es realitza el càlcul per a la carcassa cilíndrica i per als fons toriesfèrics.

### **Pressió de disseny**

La pressió de disseny per a la es calcula aplicant la norma següent:

$$Pressió de disseny = \max(1,1 \cdot P. operació, P. operació + 2atm)$$

$$Pressió de disseny = \max(1,1atm, 3atm) = 3atm$$

Per tant, sabent que la pressió d'operació és 1 atmosfera (disseny funcional amb el Hysys) es pot calcular la pressió de disseny.



Pressió operació = 1atm.

Pressió de disseny = **3atm**.

### **Temperatura de disseny**

En aquest cas, la temperatura de disseny be donada pel disseny funcional (Hysys). A continuació es presenten les temperatures d'operació per caps i cues de la columna:

Temperatura d'operació caps = 82,18 °C

Temperatura d'operació cues = 89,26 °C

La temperatura de disseny be donada:

$$Temperatura de disseny = \max(80^{\circ}\text{C}, T. operació, +15^{\circ}\text{C})$$

Temperatura de disseny caps = **97,18 °C**

Temperatura de disseny cues = **104,26 °C**

### **Material**

Per decidir quin és el millor material per la columna AB-301 cal tenir en compte que es treballa amb HCl i la corrosió que aquest compost produeix és elevada, consultant la taula de la figura 12.7.2.12 s'escull **HASTELLOY® alloy B-2** amb una corrosió menor de 0,508mm/any.

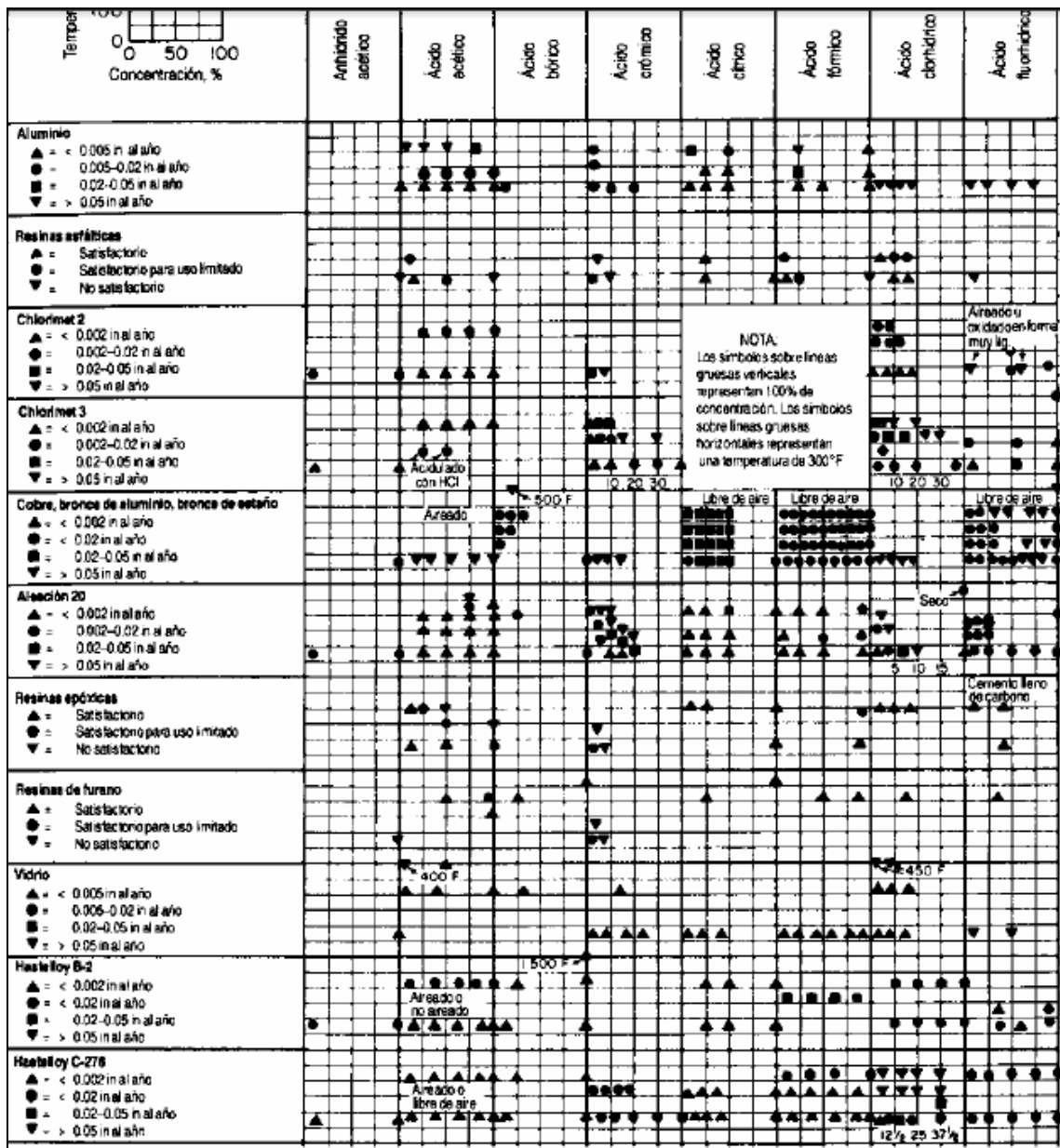


Figura 12.7.2.12 Dades detallades de corrosió en materials de construcció [Perrys Handbook]

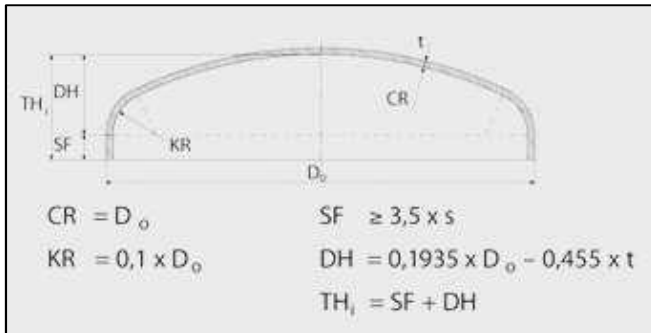
**Esponsor del fondo i el capçal. Càlcul a pressió interna**

Els tipus de fondos i capçals més utilitzats són el toriesfèric, l'hemisfèric i l'el·lipsoidal, la seva elecció depèn de les condicions d'operació i el cost econòmic, en aquest cas s'utilitza el toriesfèric.

S'hauria de realitzar el càlcul del fondo i el capçal de manera independent, ja que treballen a temperatures de disseny diferents. Com que la única diferencia ve donada per la tensió admissible del material i és la mateixa en els dos cassos degut a que la

temperatura entre caps i cues no varia massa, només fa falta realitzar el disseny d'un fondo, que serà exactament igual a l'altre.

Aquest fons ve definit pel radi de la corona (L) i el radi del colze (r) que es calculen respecte al diàmetre del cos donat pel Hysys, tal com indica la casa "Koenig-co" en la figura següent, extreta de la seva pàgina web.



**Figura 12.7.2.13.** Esquema del fons torièsferic per tal de determinar l'alçada del fons de la columna d'absorció AB-301.  $s=t$ .

Per tant,

$$L = D = 609,6 \text{ mm}$$

$$r = 0,1 \cdot D = 0,1 \cdot 609,6 \text{ mm} = 60,96 \text{ mm}$$

$$\frac{L}{r} = 10$$

Per una relació L/r menor de  $16^{2/3}$  l'espessor es calcula amb l'equació 12.7.2.4.

$$t = \frac{P \cdot L \cdot M}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad \text{Equació 12.7.2.4}$$

on:

t = espessor del fondo (mm)

P = pressió de disseny del recipient (bar) = 3

M = factor que depèn de la relació L/r, en aquest cas igual a 1,54

E = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)

S = càrrega admissible del material (bar) = 7583,4 bar

L = radi de la corona (mm) = 609,6

El sobre espessor per corrosió del material és de 0,508mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobre espessor serà 7,62 mm.

$C_1$  = marge per corrosió (mm) = 7,62 mm

$C_2$  = tolerància de fabricació (mm) = 10% de l'espessor

El resultat és de 8,62 mm, però donat que els espessors estàndards de xapa a Europa són: 3, 4, 5, 6, 8, 10, 12, 15, 20..., s'agafa un espessor dels fondos de 10 mm.

***espessor del fondo i el capçal = 10mm***

### **Espessor del cos de la columna. Càlcul a pressió interna**

L'equació 12.7.2.5 permet trobar l'espessor del cos de la columna.

$$t_1 = \frac{P \cdot R_{int}}{S \cdot E - 0,6 \cdot P} + C \cdot A \quad \text{Equació 12.7.2.5}$$

on:

$t_1$  = espessor del cos (mm)

$P$  = pressió de disseny del recipient (bar) = 3

$R_{int}$  = radi intern de la columna (mm) = 304,8

$E$  = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)

$S$  = càrrega admissible del material (bar) = 7583,4 bar

$C \cdot A$  = sobreessessor (mm)

La tolerància de fabricació pel cas d'un cilindre és nul·la i el sobre espessor per corrosió del material és de 0,508mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobreessessor serà 7,62 mm.

El resultat és de 7,762 mm, però donat que els espessors estàndards de xapa a Europa són: 3, 4, 5, 6, 8, 10, 12, 15, 20..., s'agafa un espessor del cos de 8 mm.

***espessor dels cos de la columna = 8 mm***

**Alçada dels fondo i el capçal**

Una vegada determinats els espessors del cos i els fondo i capçal es pot determinar l'alçada del fondo i el capçal per determinar l'alçada total de l'equip, tal com indica la casa "Koenig-co" en la figura anterior, extreta de la seva pàgina web.

$$DH = 0,1935 \cdot D_o - 0,455 \cdot t \quad \text{Equació 12.7.2.6}$$

$$SF = 3,5 \cdot s \quad \text{Equació 12.7.2.7}$$

$$TH = SF + DH \quad \text{Equació 12.7.2.8}$$

Es calcula l'alçada del fons toriesfèric sense tenir en compte l'espessor de la xapa, tal com s'indica a continuació:

$$DH = 0,1935 \cdot 609,6 \text{ mm} - 0,455 \cdot 10 \text{ mm} = 113,41 \text{ mm}$$

$$SF = 3,5 \cdot 10 \text{ mm} = 35 \text{ mm}$$

$$TH = 35 \text{ mm} + 113,41 \text{ mm} = 148,41 \text{ mm}$$

Per tant, l'alçada de la columna sense l'espessor és de **13297 mm**.

**12.7.2.4 Pes de la columna****Pes de la columna buida**

Es calcula el volum del fondo i el capçal de la columna mitjançant l'equació 12.7.2.9.

$$Vi = 0,1 \cdot (D_{col})^3 \quad \text{Equació 12.7.2.9}$$

Per tant,

$$Vi = 0,1 \cdot (609,6 \text{ mm})^3 = 0,0227 \text{ m}^3$$

Com que es tenen un fondo i un capçal el volum és de 0,0454 m<sup>3</sup>.

Per calcular el pes dels capçals, es calcula el volum extern del fondo i el capçal, mitjançant l'equació 12.7.2.10.

$$Ve = 0,1 \cdot ((D_{col} + 2 \cdot t)^3) \quad \text{Equació 12.7.2.10}$$

Per tant,

$$Ve = 0,1 \cdot (609,6 \text{ mm} + 2 \cdot 10 \text{ mm})^3 = 0,0250 \text{ m}^3$$

Com que es tenen dos capçals el volum és de 0,0500 m<sup>3</sup>.

Per tant, la resta correspon al volum de la paret dels capçals:

$$V_{paret} = 0,0500 \text{ m}^3 - 0,0454 \text{ m}^3 = 0,0046 \text{ m}^3$$

Es calcula el volum intern i extern del cos de la columna, per tal de determinar el volum de paret.

$$V_i = \pi \cdot \left(\frac{D_{col}}{2}\right)^2 \cdot h = \pi \cdot \left(\frac{609,6 \text{ mm}}{2}\right)^2 \cdot 13000 \text{ mm} = 3,7942 \text{ m}^3$$

$$V_e = \pi \cdot \left(\frac{D_{col} + 2 \cdot t}{2}\right)^2 \cdot h = \pi \cdot \left(\frac{609,6 \text{ mm} + 2 \cdot 8 \text{ mm}}{2}\right)^2 \cdot 13000 \text{ mm}$$

$$= 3,9960 \text{ m}^3$$

$$V_{paret} = 3,9960 \text{ m}^3 - 3,7942 \text{ m}^3 = 0,2018 \text{ m}^3$$

Per tant, el volum total de la paret de la columna és de  $0,2064 \text{ m}^3$ .

Sabent que la densitat del Hastelloy B2 és de  $9220 \text{ Kg/m}^3$ , es pot calcular el pes de la columna buida, tal com s'indica a continuació:

$$0,2064 \text{ m}^3 \cdot \frac{9220 \text{ Kg}}{1 \text{ m}^3} = 1903 \text{ Kg}$$

Es considera que el pes dels elements interns és del 10 % del total del pes de l'equip buit, tal com s'indica a continuació.

$$Pes \text{ elements interns} = 0,1 \cdot 1903 \text{ Kg} = 190,3 \text{ Kg}$$

El pes del reblliment ve donat pel Hysys i és de  $783,4 \text{ Kg}$  pel sobredimensionat, per tant es calcula el pes total de la columna buida:

$$Pes \text{ buit} = 1903 \text{ Kg} + 190,3 \text{ Kg} + 783 \text{ Kg} = \mathbf{2876 \text{ Kg}}$$

### **Pes de la columna plena d'aigua**

Es calcula el volum de la columna sumant el volums dels capçals i el cos:

$$V_{col} = 0,0454 \text{ m}^3 + 3,7942 \text{ m}^3 = 3,8396 \text{ m}^3$$

Per tant, amb la densitat de l'aigua a la temperatura d'operació mitjana i el pes de la columna buida es pot calcular el pes de la columna amb aigua:

$$Pes_{col \text{ aigua}} = 2876 \text{ Kg} + 3,8396 \text{ m}^3 \cdot \frac{997,13 \text{ Kg}}{1 \text{ m}^3} = 6705 \text{ Kg}$$

**Pes de la columna en operació**

A partir de la densitat mitjana del fluid d'operació es calcula el pes de la columna en operació:

$$Pes_{col\ operació} = 2876 \text{ Kg} + 3,8396 \text{ m}^3 \cdot \frac{376,12 \text{ Kg}}{1 \text{ m}^3} = 4320 \text{ Kg}$$

**12.7.2.5 Aïllament**

Degut a que la temperatura d'operació de l'equip és superior a 60°C cal aïllar l'equip amb llana de vidre. Com que l'espessor dels capçals i del cos no és el mateix, s'agafa el cas més desfavorable donat per l'espessor més gran. L'espessor d'aquest aïllant es pot calcular com:

$$X = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{\Delta T}{D_{ext}}\right)^{\frac{1}{4}}} \quad \text{Equació 12.7.2.11}$$

on:

X = espessor de l'aïllant (cm)

$\Delta T$  = diferència de temperatura entre l'interior i l'exterior del recipient

$D_{ext}$  = diàmetre exterior del recipient (m)

Si es compara l'espessor calculat de l'aïllant amb el que es pot trobar en les conduccions, es decideix augmentar el valor obtingut pel doble per assegurar un bon aïllament.

$$X = 1,87 \text{ cm} \times 2 = 3,74 \text{ cm}$$

Aquest aïllant quedarà recobert per una capa d'alumini per tal de protegir-lo de les inclemències meteorològiques.

Es calcula el volum de l'aïllant calculant el volum als fondos i al cos, els resultats es presenten a la taula 12.7.2.12.

**Taula 12.7.2.12.** Càlcul del volum d'aïllant necessari en la columna CD-301

Volum aïllant capçal (m <sup>3</sup> )	0,01
Volum aïllant fondo (m <sup>3</sup> )	0,01
Volum aïllant cos (m <sup>3</sup> )	1,09
<b>Volum aïllant total (m<sup>3</sup>)</b>	<b>1,11</b>

### 12.7.3 introducció Columnes de destil·lació

Per al disseny de les columnes de destil·lació es realitza el mètode teòric que utilitza les equacions de Fenske i Underwood i la correlació de Gilliland per trobar el nombre d'etapes d'equilibri necessàries i el plat de l'aliment. A més, s'ha utilitzat el simulador de processos químics AspenTech "Hysys v 7.3" per realitzar un disseny funcional aproximat i rigorós i comparar-ho amb el disseny teòric.

Pel que fa al dimensionament, en el cas del càlcul del diàmetre de la columna es compara el resultat obtingut pel Hysys amb el mètode teòric que utilitza el gràfic d'Eckert.

#### **Disseny amb AspenTech "Hysys v 7.3"**

El Hysys permet dissenyar una columna de destil·lació, però com que és un programa de simulació necessita dades que a priori no se saben, com la relació de reflux o el cabal de destil·lat. Per obtenir aquestes dades es realitza el disseny amb el mètode de "Shortcut Column". Aquest mètode necessita els paràmetres de pressió al condensador i al reboiler, i composició del component clau pesat per caps i del component clau lleuger per cues. La pressió és coneguda i es considera de que no canvia al llarg de la columna.

Per saber quin és el component clau pesat i el component clau lleuger es busquen les temperatures d'ebullició de cada component pur al Hysys i s'ordenen de menys a més volàtil. Els components claus són aquells en els que es baixa la destil·lació i s'obtenen tant en el destil·lat com en el corrent de cues. El clau lleuger és el més volàtil dels que s'obtenen en els dos corrents i el clau pesat el menys volàtil. Per saber la composició dels dos components clau, es considera que al corrent de destil·lat surten tots els mols dels no claus lleugers i que per cues s'obtenen tots els mols dels no claus pesats que entren a la columna.

#### **Disseny pel mètode aproximat "ShortCut Column"**

El mètode de "ShortCut Column" permet realitzar el disseny de la columna de manera més ràpida a base de realitzar algunes suposicions, com que els cabals molars són



constants i que les volatilitats relatives també ho són. Cal dir que se simplifica molt el càlcul però no deixa de ser un mètode aproximat.

La dades que requereix el subprograma per funcionar són les següents:

- Cabal i composició del corrent d'entrada.
- Fracció molar del component clau lleuger a cues.
- Fracció molar del component clau pesat al destil·lat.
- Pressió del condensador i del reboiler.

Amb la informació introduïda, el subprograma calcula una relació de reflux mínima amb la que es calcula la relació de reflux que s'utilitzarà per a fer el càlcul aproximat de les etapes necessàries per a la separació, etapa de l'aliment, cabal de destil·lat i les temperatures al reboiler i condensador. Es considera que la relació de reflux és 1,2 vegades la relació de reflux mínima. Aquesta informació serà la que caldrà utilitzar per a la simulació amb el mètode rigorós.

### **Disseny pel mètode rigorós "Distillation Column"**

El mètode rigorós és un mètode que resol tots els balanços de matèria i d'energia sense realitzar cap hipòtesi. El problema d'aquest mètode és que té un càlcul llarg i que s'han de conèixer algunes dades desconegudes a priori. La solució abans esmentada és determinar-les mitjançant el mètode "Shortcut Column".

Per a fer la simulació rigorosa caldrà:

- Definir el cabal d'entrada amb els valors obtinguts del balanç de matèria
- Introduir el numero d'etapes d'equilibri i l'etapa de l'aliment
- Introduir les pressions i temperatures del condensador i del reboiler
- Indicar si el condensador es total o parcial
- Introduir la relació de reflux
- Introduir el cabal de destil·lat

Un cop definida aquesta informació el subprograma ja és capaç de resoldre la columna.

## 12.7.4 Columna de destil·lació CD-301

### 12.7.4.1 Disseny funcional

La finalitat de la columna de destil·lació CD-301 és eliminar l'HCl de la mescla gasosa que surt per caps de la columna d'absorció AB-301. L'HCl té una temperatura d'ebullició de  $-85^{\circ}\text{C}$  a pressió atmosfèrica, per tant com es vol obtenir HCl pràcticament pur per caps de columna s'hauria de refredar aquest HCl en el condensador per tal d'obtenir el reflux líquid a  $-85^{\circ}\text{C}$ . Treballar a temperatures tant baixes fa inviable el procés i fa que s'hagi de dissenyar un procés a pressió, per tal d'obtenir una temperatura d'ebullició de l'HCl molt més alta. S'ha decidit treballar a 26 atmosferes, fent que el condensador treballi a  $1^{\circ}\text{C}$ .

Aquest fet comporta una sèrie d'operacions prèvies a l'entrada de la columna per tal de tenir l'aliment a aquesta pressió. Primerament, s'augmenta la pressió del corrent de sortida gasós de l'absorbidor amb un compressor, fent que la temperatura del gas augmenti molt. Com que no convé entrar aquest gas a una temperatura tant alta a la columna, s'afegeix un intercanviador de calor previ a l'entrada que refreda la mescla. Al refredar-la es provoca la formació d'una petita part líquida, fent que aquest intercanviador hagi de ser dissenyat com un condensador (cooler+separator). Es separa l'entrada gasosa de la líquida i es fan entrar les dues pel mateix plat de columna.

### Disseny teòric

Es realitza el disseny teòric de la columna mitjançant el mètode de "Shorcut " teòric, que utilitza "Fenske", "Underwood" i la correlació de "Gilliand" per trobat el número d'etapes necessàries i l'etapa de l'aliment.

Prèviament, són necessàries les volatilitats relatives dels diferents compostos respecte el component clau pesat, és a dir, el foscè. La volatilitat relativa d'un compost ve definida per l'equació 12.7.4.1. Com que la volatilitat depèn de la temperatura,

s'utilitzarà una volatilitat relativa mitjana a la temperatura de l'aliment. També s'utilitzarà la pressió d'operació de la columna.

$$\alpha_{i,j} = \frac{k_i}{k_j} \quad \text{Equació 12.7.4.1}$$

on,

$\alpha_{i,j}$ : volatilitat relativa del component i respecte del component j

$k_i$ : constant d'equilibri del component i

$k_j$ : constant d'equilibri del component j (component de referència – heavy key)

S'extreuen les constants d'equilibri de cada compost amb el Hysys a la temperatura i pressió de l'aliment. Els resultats es presenten a la taula 12.7.4.1.

**Taula 12.7.4.1.** Constants d'equilibri per cada compost a la temperatura i pressió d'entrada de l'aliment.

Compost	k
MCC	0,538
HCl	4,669
Toluè	0,409
Fosgè	1,622

Per tant, a partir d'aquestes es poden calcular les volatilitats relatives de cada compost respecte el fosgè, els resultats es presenten a la taula 12.7.4.2.

**Taula 12.7.4.2** Volatilitats relatives respecte el fosgè a la temperatura i pressió d'entrada a la columna CD-301.

Compost	$\alpha_{i, fosgè}$
MCC	0,331
HCl	2,879
Toluè	0,252
Fosgè	1,000

Es fixa la fracció recuperada dels compostos claus que es vol obtenir en el destil·lat i en el residu, tal com s'indica a continuació.

$$FR_{fosgè,B} = 0,9999$$

$$FR_{HCl,D} = 0,9999$$

Mitjançant l'equació de Fenske, presentada a continuació, es calcula el número mínim d'etapes necessàries per a la separació desitjada.

$$N_{min} = \frac{\ln\left(\frac{FR_{LK,D} \cdot FR_{HK,B}}{(1-FR_{LK,D}) \cdot (1-FR_{HK,B})}\right)}{\ln(\alpha_{LK-HK})} \quad \text{Equació 12.7.4.2}$$

on,

$FR_{LK,D}$ : fracció recuperada del clau lleuger en el destil·lat

$FR_{HK,B}$ : fracció recuperada del clau pesat en el refinat

$(\alpha_{LK-HK})$ : volatilitat relativa del component clau lleuger respecte del component clau pesat

Per tant,

$$N_{min} = \frac{\ln\left(\frac{0,9999 \cdot 0,9999}{(1 - 0,9999) \cdot (1 - 0,9999)}\right)}{\ln(2,879)} = 17,42 \approx 18 \text{ etapes d'equilibri}$$

El balanç de matèria es presenta a continuació:

- Balanç de matèria global  
 $F=B+D$   
 $V=L+D$
- Balanç de matèria pel component i  
 $F \cdot x_{F,i} = B \cdot x_{B,i} + D \cdot x_{D,i}$

S'ordenen els components per la seva volatilitat (de k més alta a més baixa) en la taula 12.7.4.3 i es resol el balanç de matèria considerant que els no claus lleugers surten totalment per caps i els no claus pesats surten totalment per baix.

**Taula 12.7.4.3.** Balanç de matèria teòric a la columna CD-301 una vegada imposades les fraccions recuperades dels components claus.

	Compost	k	z <sub>i,F</sub>	F·z <sub>i,F</sub>	y <sub>i,D</sub>	D·y <sub>i,D</sub>	x <sub>i,B</sub>	B·x <sub>i,B</sub>
LK	HCl	4,669	0,4630	8,7100	0,99998	8,7091	0,0001	0,0009
HK	Fosgè	1,622	0,1025	1,9282	0,00002	0,0002	0,1908	1,9280
HNK	MCC	0,538	0,0515	0,9688	0,00000	0,0000	0,0959	0,9688
HNK	Toluè	0,409	0,3830	7,2050	0,00000	0,0000	0,7132	7,2050
			<b>F</b> (kmols/h)	<b>18,812</b>	<b>D</b> (kmols/h)	<b>8,7093</b>	<b>B</b> (kmols/h)	<b>10,1027</b>

Una vegada resolt el balanç de matèria, es calcula el  $(L/D)_{\min}$  mitjançant el mètode de Underwood, tal com s'indica a continuació:

$$(\Delta V)_F = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i \cdot F \cdot z_{i,F}}{\alpha_i - \phi} \quad \text{Equació 12.7.4.3}$$

On s'imposa  $(\Delta V)_F=0$  i es troba el valor de  $\phi$ , resolent l'equació 12.7.4.3.

El valor de  $\phi$  trobat és de 1,158; a partir d'aquest valor es calcula el valor de  $V_{\min}$  mitjançant l'equació 12.7.4.4.

$$(V)_{\min} = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i \cdot D \cdot y_{i,D}}{\alpha_i - \phi} \quad \text{Equació 12.7.4.4}$$

Trobant un valor de  $V_{\min}=14,57$  Kmols/h.

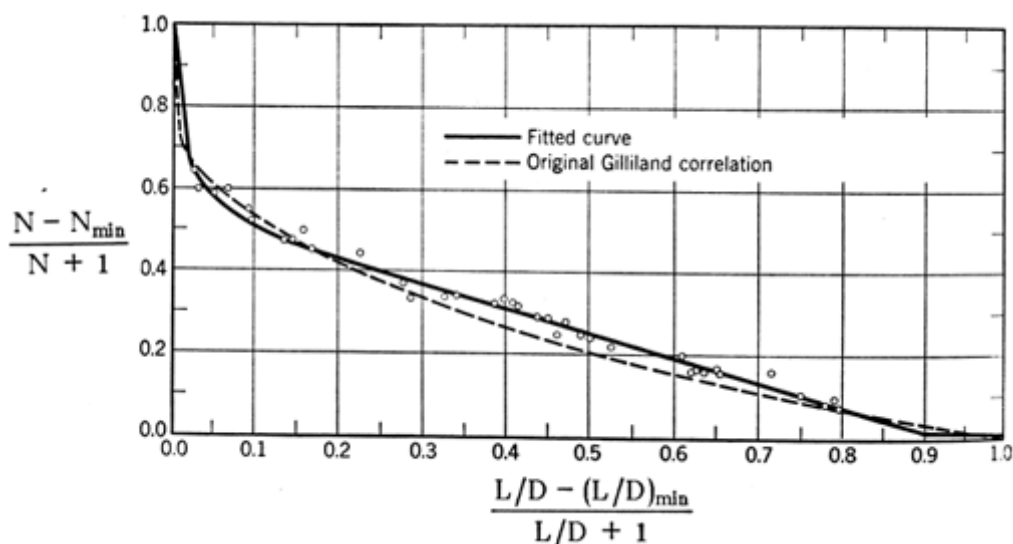
A partir del valor de  $V_{\min}$  es calcula  $(L/D)_{\min}$ , tal com s'indica en l'equació 12.7.4.5.

$$\left(\frac{L}{D}\right)_{\min} = \frac{(V)_{\min}}{D} - 1 \quad \text{Equació 12.7.4.5}$$

Trobant un valor de  $\left(\frac{L}{D}\right)_{\min} = 0,6729$

Es considera que  $\left(\frac{L}{D}\right) = 1,2 \cdot \left(\frac{L}{D}\right)_{\min} = 0,8075$

Sabent el valor de  $\left(\frac{L}{D}\right)_{\min}$  i  $\left(\frac{L}{D}\right)$  es passa a utilitzar la correlació de Gilliland, presentada a la figura 12.7.4.1, que permet obtenir el número d'etapes d'equilibri necessàries a la columna.



**Figura 12.7.4.1.** Gràfic de la correlació de Gilliland per al càlcul del número d'etapes necessàries en la columna CD-301.

Sabent,

$$\frac{\frac{L}{D} - \left(\frac{L}{D}\right)_{\min}}{\frac{L}{D} + 1} = \frac{0,8075 - 0,6729}{0,8075 + 1} = 0,074$$

Es troba el valor de les ordenades utilitzant la corba "Original Gilliland correlation":

$$\frac{N - (N)_{\min}}{N + 1} = 0,55$$

Per tant, es troba un valor de **N de 42 etapes**.

Per trobar l'etapa de l'aliment mínima s'utilitza l'equació 12.7.4.6

$$N_{F,\min} = \frac{\ln\left(\frac{\left(\frac{x_{LK}}{x_{HK}}\right)_D}{\frac{z_{LK}}{z_{HK}}}\right)}{\ln(\alpha_{LK-HK})} \quad \text{Equació 12.7.4.6}$$

on,

$z_{LK}$ : fracció molar del component clau lleuger a l'aliment

$z_{HK}$ : fracció molar del component clau pesat a l'aliment

Es resol l'equació:

$$N_{F,\min} = \frac{\ln\left(\frac{0,99998}{\frac{0,00002}{\frac{0,4630}{0,1025}}}\right)}{\ln(2,879)} = 8,806 \approx \text{Etapa 9}$$

Per trobar l'etapa de l'aliment s'utilitza l'equació 12.7.4.7, presentada a continuació.

$$\frac{N_{F,\min}}{N_{\min}} = \frac{N_F}{N} \quad \text{Equació 12.7.4.7}$$

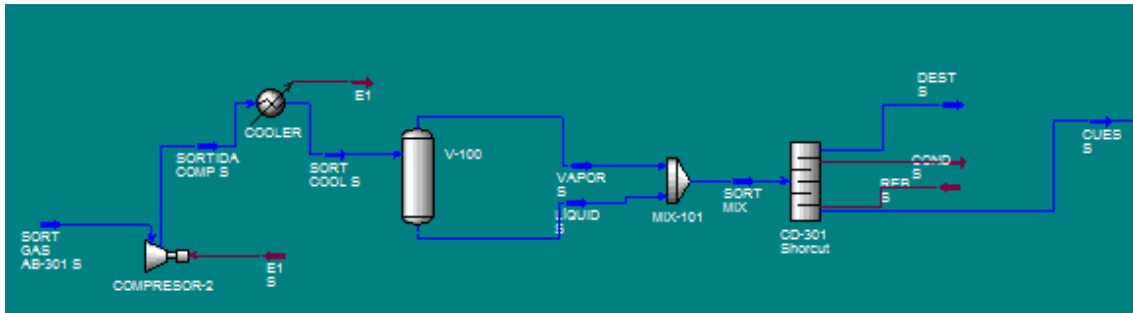
Per tant,

$$N_F = \frac{N_{F,\min}}{N_{\min}} \cdot N = \frac{9}{18} \cdot 42 = 21 = \text{Etapa 21}$$

### Disseny amb AspenTech "Hysys v 7.3"

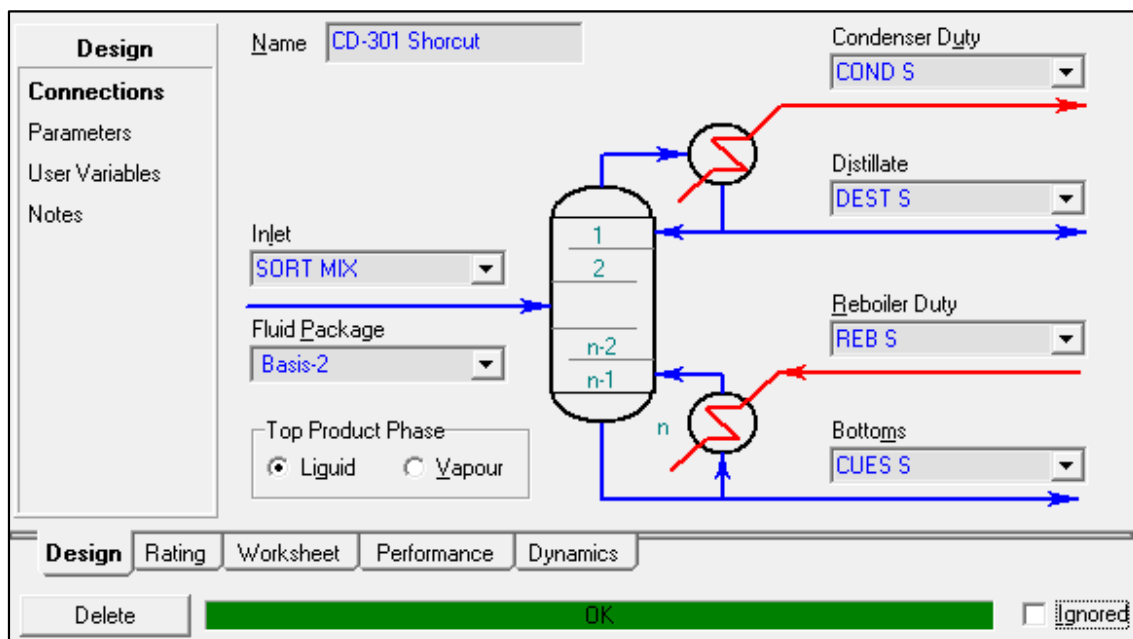
Es dissenya la columna de destil·lació CD-301 pel mètode "Shortcut Column", s'imposa una fracció molar del component clau pesat per caps i del component clau lleuger per cues molt baixa (0,0001), ja que es vol obtenir una separació molt alta per separar la màxima quantitat d'HCl.

A la figura 12.7.4.2 es presenta l'esquema general utilitzat en el Hysys per realitzar el disseny de la columna de destil·lació CD-301, s'inclouen les operacions prèvies a la destil·lació. En aquest cas, com aquest subprograma no permet més d'una entrada a la columna, es fa una barreja just abans d'entrar del corrent gasós i líquid.



**Figura 12.7.4.2.** Esquema general utilitzat en el Hysys pel disseny de la columna CD-301 pel mètode de "Shortcut Column"

A la figura 12.7.4.3 es presenta la pantalla principal utilitzada en el Hysys pel disseny de la columna CD-301 pel mètode de "Shortcut Column".



**Figura 12.7.4.3.** Pàgina principal del disseny de la columna de destil·lació CD-301 pel mètode de "Shortcut Column".

A la figura 12.7.4.4 es presenten les condicions imposades en el Hysys per obtenir la separació desitjada. S'imposa un valor de relació de reflux 1,2 vegades més gran que la mínima.

**Figura 12.7.4.4** Condicions imposades per al disseny del “Shortcut Column” en la columna CD-301.

Una vegada imposades les condicions, s’obté el disseny de la columna amb el mètode de “Shorcut Column” amb els paràmetres presentats a la taula 12.7.4.4.

**Taula 12.7.4.4.** Paràmetres de disseny obtinguts amb el mètode de “Shorcut column” per a la columna de destil·lació CD-301.

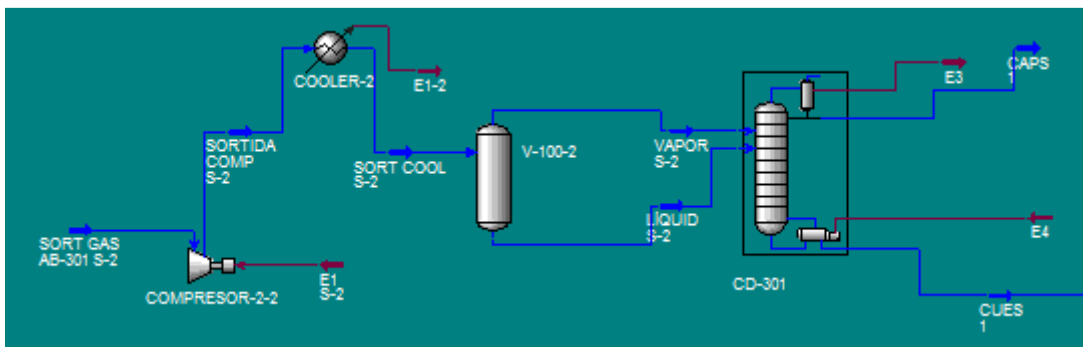
<b>Plats</b>	
Número mínim de plats	10,763
Número de plats	26,016
Plat de l'aliment	11,223
<b>Temperatures</b>	
Condensador (°C)	1,11
Reboiler (°C)	250,10
<b>Cabals</b>	
Rectificació vapor (Kmols/h)	19,180
Rectificació líquid (kmols/h)	10,297
Stripping vapor (kmols/h)	3,755
Stripping líquid (kmols/h)	14,248
Calor condensador (KJ/h)	-220591,579
Calor reboiler (KJ/h)	18931,212

Un cop feta l’aproximació amb el mètode “ShortCut Column” es realitza el mètode rigorós “Distillation Column”. Amb els paràmetres donats pel mètode aproximat el



Hysys no és capaç de resolre la columna i es fa necessari canviar alguns dels paràmetres del disseny, com són la relació de reflux i el número de plats. Per arribar a la separació desitjada es decideix augmentar la relació de reflux fins a 3. Encara que amb 27 plats i amb l'etapa de l'aliment al plat 12 s'obté la separació desitjada, es decideix imposar 42 etapes d'equilibri amb l'etapa de l'aliment a 21, ja que és el valor trobat pel mètode teòric i aquest és més conservatiu.

A la figures següents es presenta l'esquema general utilitzat en el Hysys per realitzar el disseny de la columna de destil·lació CD-301, s'inclouen les operacions prèvies a la destil·lació.



**Figura 12.7.4.5.** Esquema general utilitzat en el Hysys pel disseny de la columna CD-301 pel mètode de "Distillation Column"

A la figura 12.7.4.6 es presenta la pantalla principal del disseny realitzat amb el Hysys amb el mètode "Distillation Column".

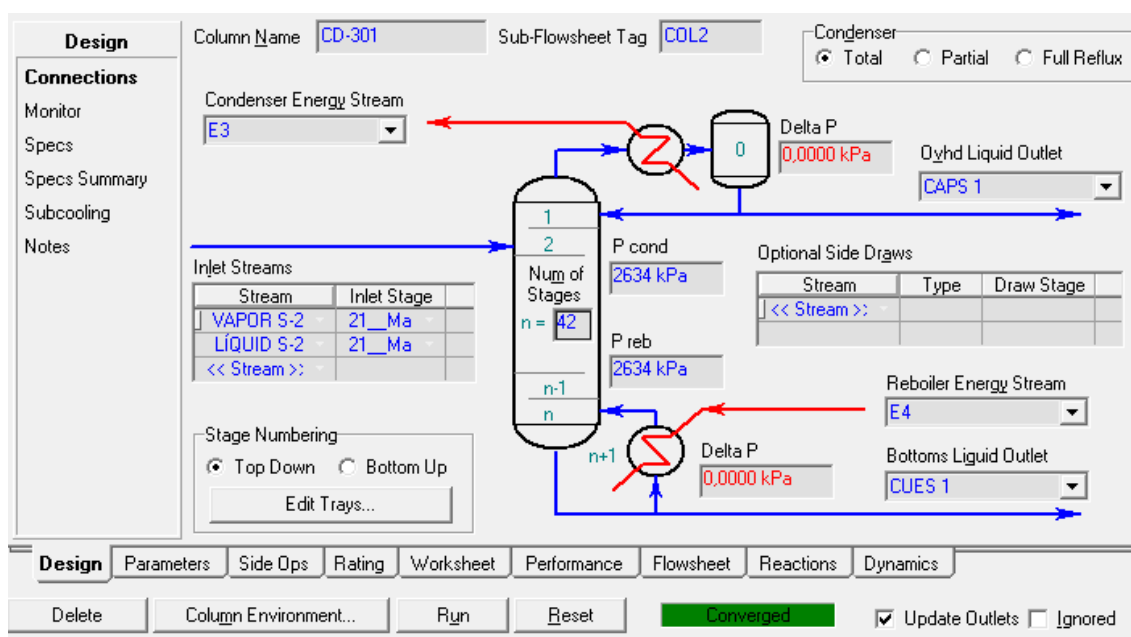


Figura 12.7.4.6. Pàgina principal del disseny de la columna de destil·lació CD-301.

Si el disseny de la columna és correcte i el Hysys ha trobat una solució, s'observa una icona en verd on diu "Converged". A les taules 12.7.4.5 i 12.7.4.6 es presenten les condicions de treball i les composicions dels corrents respectivament, per tant, el balanç de matèria a la columna CD-301 donat pel Hysys.

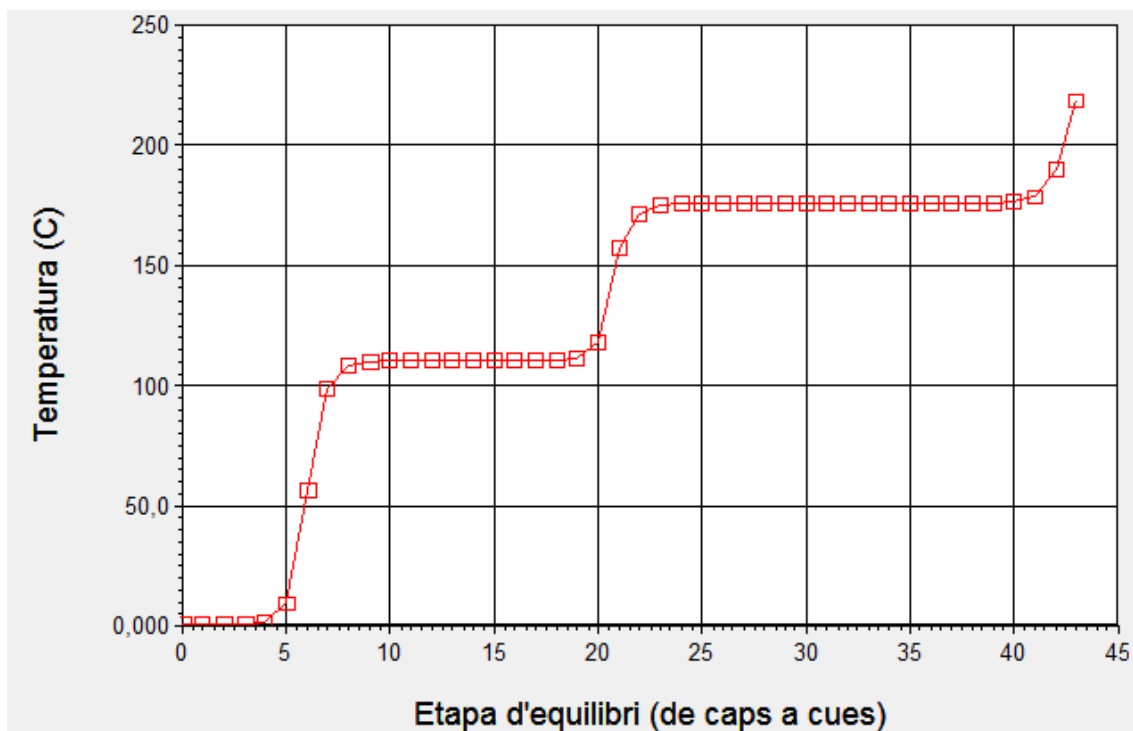
Taula 12.7.4.5 Condicions de treball a la columna d'absorció CD-301. Balanç de matèria.

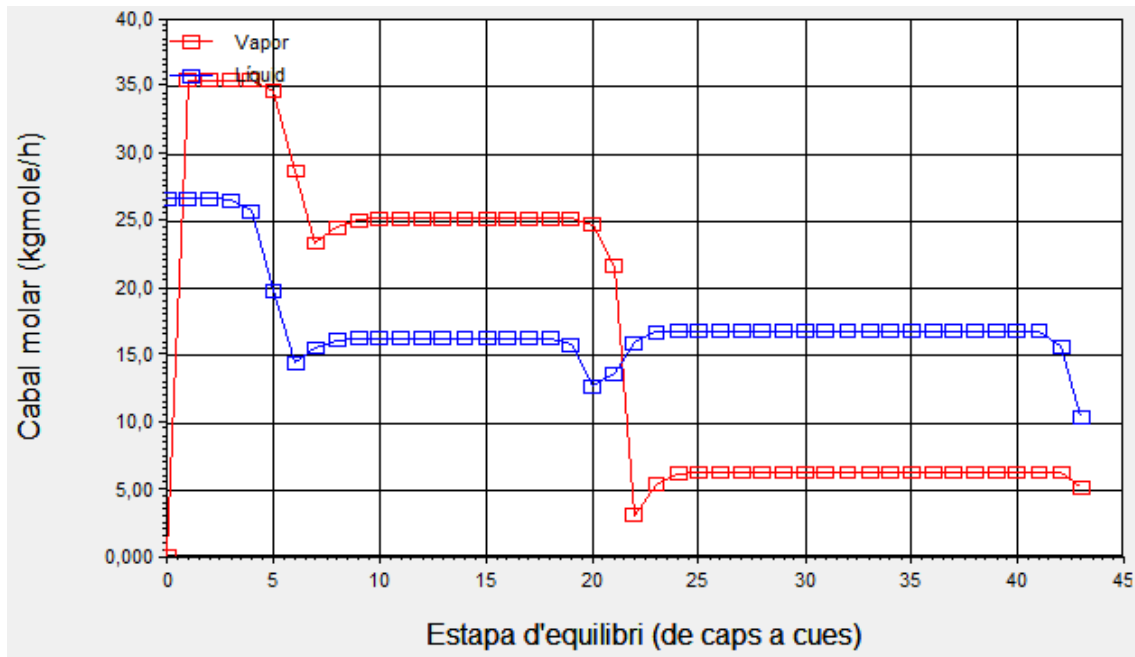
Corrent	Entrada vapor	Entrada líquida	Sortida caps	Sortida cues
<b>Fracció vapor</b>	0,9165	0,1754	0,0000	0,0000
<b>Temperatura (°C)</b>	202,5	202,5	1,105	218,8
<b>Pressió (Kpa)</b>	2635	2635	2634	2634
<b>Cabal molar (Kmol/h)</b>	15,430	3,951	8,883	10,490
<b>Cabal màssic (Kg/h)</b>	964,9	340,6	323,9	981,6
<b>Cabal de líquid (m<sup>3</sup>/h)</b>	1,053	0,3876	0,3721	1,068
<b>Entalpia molar (KJ/Kmol)</b>	-5,71E+04	-4207,00	-1,06E+05	-2,24E+04
<b>Entropia molar</b>	182,1	121,5	187,0	149,4
<b>Flux de calor (KJ/h)</b>	-8,80E+05	-1,66E+04	-9,42E+05	-2,35E+05

**Taula 12.7.4.6** Composicions dels cabals a la columna d'absorció CD-301.

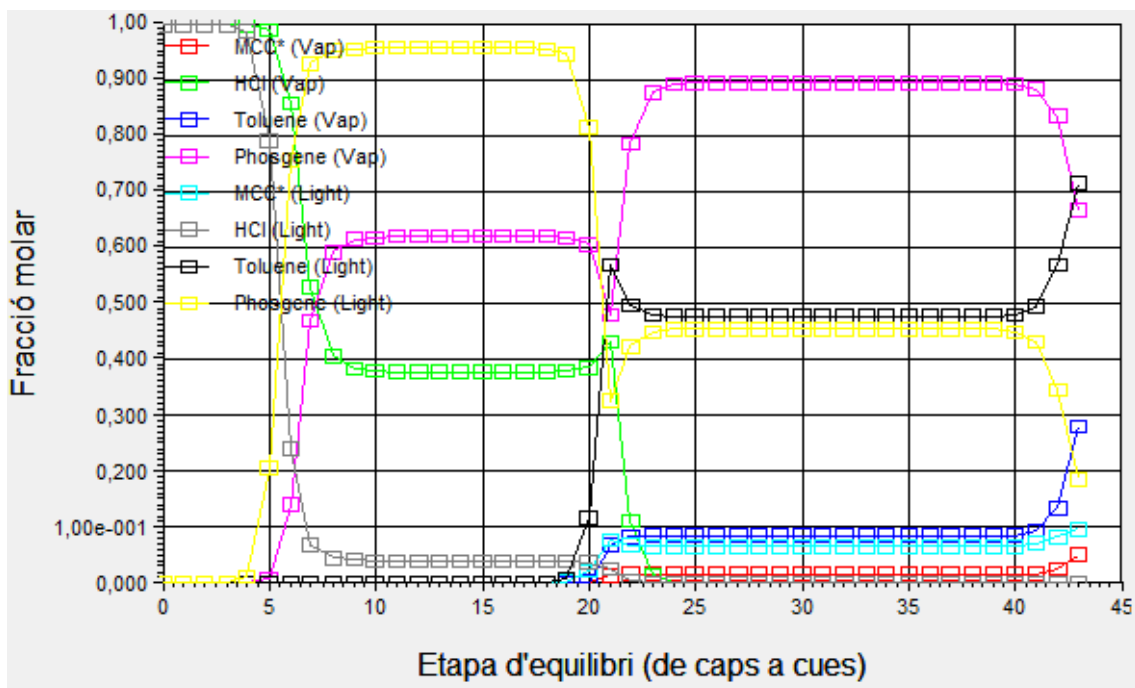
Corrent	Entrada vapor	Entrada líquida	Sortida caps	Sortida cues
MCC	0,0451	0,0838	0,0000	0,0978
HCl	0,5459	0,1169	1,0000	0,0000
MIC	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Toluè	0,2989	0,7314	0,0000	0,7148
Fosgè	0,1101	0,0679	0,0000	0,1875
1-naftol	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Carbaril	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

S'obté una columna de 42 etapes d'equilibri, amb l'etapa de l'aliment a la 21. Com s'observa amb una columna d'aquestes característiques s'aconsegueix la separació total d'HCl, obtenint d'aquesta manera un destil·lat amb una puresa del 100% i un residu en absència d'HCl i la totalitat del cabal molar de fosgè, toluè i MCC de l'entrada. Una vegada dissenyada la columna, el programa Hysys permet obtenir diferents gràfics, com temperatura, caudal i composició en funció del plat d'equilibri. Aquests es presenten a les figures 12.7.4.7, 12.7.4.8 i 12.7.4.9.

**Figura 12.7.4.7** Temperatura en funció del número d'etapa d'equilibri a la columna de destil·lació CD-301.



**Figura 12.7.4.8** Cabal molar del vapor i del líquid en funció del número d'etapa d'equilibri a la columna de destil·lació CD-301.



**Figura 12.7.4.9.** Composició dels diferents components en funció del número d'etapa d'equilibri a la columna de destil·lació CD-301.

Per tant, s'ha utilitzat el disseny definitiu amb el Hysys encara que utilitzant el valors de les etapes d'equilibri i etapa de l'aliment teòriques trobades, ja que eren més conservatives que el disseny amb el Hysys.

### 12.7.4.2 Dimensionat

Una vegada realitzats tots els càlculs es realitza el dimensionat de la columna. Per defecte, el mètode rigorós treballa amb un diàmetre de 1,5 metres. Com a espai entre plats ha calculat 0,55 metres, un número lògic en les columnes de rectificació. Per realitzar un dimensionat més acurat, el Hysys conté una aplicació anomenada “Tray Sizing”.

Aquesta aplicació permet calcular el diàmetre i alçada de la columna tant si es fa de plats com si es fa de reblliment. En aquest cas, és preferible utilitzar la columna de reblliment, ja que el diàmetre calculat segons el “Tray sizing” és de 0,4572 metres. A més, les columnes de reblliment són més barates i treballen millor amb fluids corrosius.

El Hysys permet escollir el tipus de reblliment i el material. Se sap que a mesura que el diàmetre del reblliment és més gran l'alçada de la columna augmenta. En aquest cas, es decideix no utilitzar HASTELLOY® alloy B-2 pel reblliment ja que fent servir reblliment d'aquest material (metall al Hysys) s'obté una relació alçada-diàmetre massa gran, obtenint una columna molt llarga en relació amb el diàmetre, que pot provocar problemes en la circulació del flux o camins preferencials. Per tant, es decideix utilitzar com a material acer al carboni ja que permet tenir la mateixa eficiència amb menys alçada de reblliment, a més s'ha trobat bibliogràficament que aquest material treballa bé amb clorur d'hidrogen. Tot i així, encara que hi haguessin problemes de corrosió en el reblliment degut a que hi ha altres compostos corrosius a més de l'HCl, aquest es podria canviar per un nou sense gaire problemes. És per això que s'ha fet la carcassa de la columna de HASTELLOY® alloy B-2 i el reblliment d'acer al carboni.

Es decideix utilitzar Raschig Rings i s'escull la seva mida segons la taula 12.7.4.7.

**Taula 12.7.4.7** Mida del reblliment segons el diàmetre de la columna.

Mida del reblliment (polzades)	Diàmetre de la columna (m)
1/2" - 5/8"	0,1524 - 0,3048
5/8" - 1"	0,3048 - 0,4572
1" - 1 <sup>1/2</sup> "	0,4572 - 0,6096
1 <sup>1/2</sup> " - 2"	0,6096 - 1,2192
2" - 3"	>1,2192

Es decideix utilitzar Raschig Rings de 5/8 polzades distribuït de manera aleatòria. A la figura 12.7.4.10 es presenta el rebliment utilitzat en la columna CD-301.



**Figura 12.7.4.10.** Rebliment utilitzat en la columna CD-301. Raschig Rings.

A la taula 12.7.4.8 es presenten els paràmetres del disseny del Hysys per la columna CD-301.

**Taula 12.7.4.8.** Paràmetres de disseny del Hysys del dimensionat de la columna CD-301.

<b>Elements interns de la columna</b>	
Tipus de rebliment	Raschig Rings 1/16 in wall (Csteel, random) 5/8 polzada
Correlació inundació	SLEv73
Correlació HETP	Hands
Número de peçes de rebliment	-
Pes del rebliment (Kg)	-
Estimació del cost del rebliment (\$)	-
<b>Geometria de la columna</b>	
Diàmetre (m)	0,4572
Àrea transversal (m <sup>2</sup> )	0,1642
Alçada del rebliment (m)	3,157
<b>Resultats hidràulics</b>	
Inundació màxima (%)	44,47
Pèrdua de càrrega (Kpa)	0,3143
Pèrdua de càrrega per metre de rebliment	0,0996
Velocitat del gas (m <sup>3</sup> /h·m <sup>2</sup> )	418,9
Velocitat del gas (m/s)	0,116

Per comprovar els resultats obtinguts amb el Hysys, es comprova el diàmetre de la columna obtingut mitjançant el mètode teòric que utilitza el gràfic d'Eckert, presentat a la figura 12.7.4.11

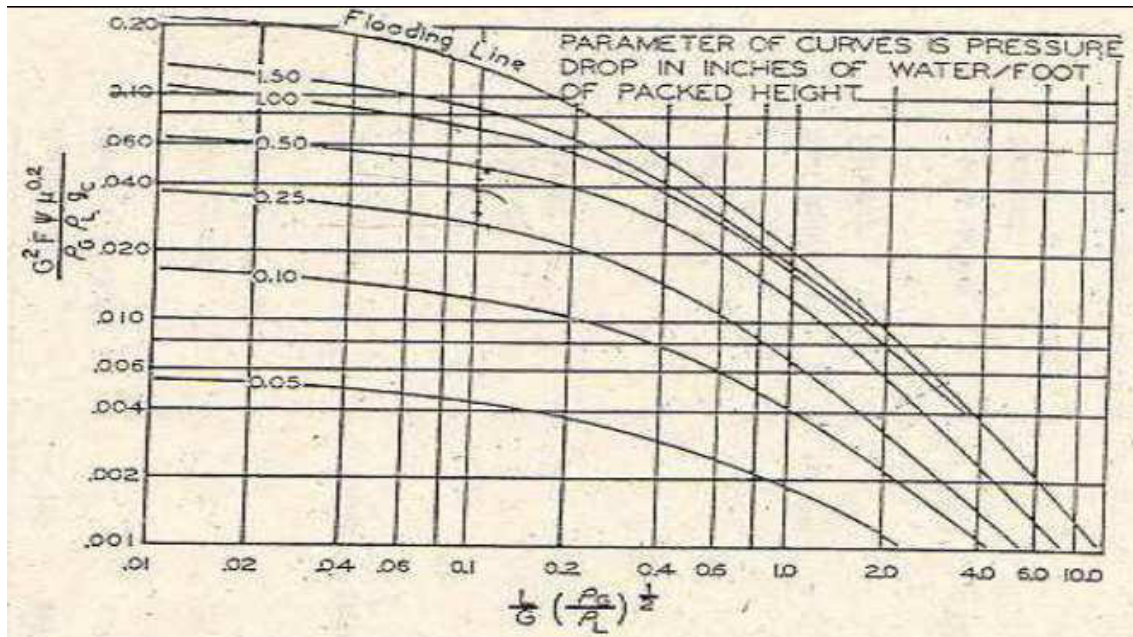


Figura 12.7.4.11. Gràfic d'Eckert

Per poder trobar el diàmetre, primerament es troba el valor de l'eix de les abscisses, definit per l'equació 12.7.4.8

$$\frac{L}{G} \cdot \left( \frac{\rho_G}{\rho_L} \right)^{1/2} \quad \text{Equació 12.7.4.8}$$

on,

L: cabal total de líquid (kmols/h)

G: cabal total de gas (kmols/h)

$\rho_G$ : densitat del gas (lb/ft<sup>3</sup>)

$\rho_L$ : densitat del líquid (lb/ft<sup>3</sup>)

Com que el cabals de líquid i de gas no són constants en la columna es calcula el diàmetre en dos parts de la columna, la part superior i la part inferior, utilitzant els cabals donats pel Hysys. A la taula 12.7.4.9 es presenten els paràmetres de l'equació utilitzats per cada zona on es calcula el diàmetre.

Taula 12.7.4.10. Paràmetres de l'equació 12.7.4.8 utilitzats per cada zona on es calcula el diàmetre.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR
L (kmols/h)	26,649	15,672
G (kmols/h)	35,533	5,180
$\rho_G$ (lb/ft <sup>3</sup> )	2,630	3,889
$\rho_L$ (lb/ft <sup>3</sup> )	58,250	46,080

A la taula 12.7.4.11 es presenta el valor de les abscisses per les dues zones calculades amb els valors dels paràmetres de la taula 12.7.4.10.

**Taula 12.7.4.11.** Valor de les abscisses pel gràfic d'Eckert.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR
Valor abscisses (Eckert)	0,1594	0,8790

Considerant que la columna treballa a un 50% de la seva velocitat d'inundació s'arriba a una valor de l'eix d'ordenades, i mitjançant l'equació 12.7.4.9 es calcula el valor del cabal del gas en unitats de cabal dividides per l'àrea de pas, que permet obtenir aquesta última.

**Taula 12.7.4.12** Valor de les ordenades pel gràfic d'Eckert.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR
Valor d'ordenades (Eckert)	0,0420	0,0150

$$\frac{G^2 \cdot F \cdot \varphi \cdot \mu^{0,2}}{\rho_G \cdot \rho_L \cdot g_C} \quad \text{Equació 12.7.4.9}$$

on:

G: flux de gas (lb/s·ft<sup>2</sup>)

F: factor d'ompliment

$\varphi$  : relació entre la densitat de l'aigua i la del líquid

$\mu$ : viscositat del líquid (cP)

$g_C$ : constant de gravetat (32lb·ft/lb<sub>f</sub>·s<sup>2</sup>)

Mitjançant l'equació 12.7.4.10 es pot calcular el valor de l'àrea de la columna, amb la que es pot obtenir el diàmetre per cada zona, com es presenta a la taula 12.7.4.13.

$$A = \frac{G \left( \frac{lb}{s} \right)}{G \left( \frac{lb}{s \cdot ft^2} \right)} \quad \text{Equació 12.7.4.10}$$



**Taula 12.7.4.13.** Paràmetres necessaris per al càlcul del diàmetre de la columna CD-301. Valor del diàmetre trobat per a les dues zones.

	PART SUPERIOR	PART
F	170,000	170,000
$\varphi$	1,072	1,355
$\mu$ (cP)	0,111	0,140
$\rho_G$ (lb/ft <sup>3</sup> )	2,630	3,889
$\rho_L$ (lb/ft <sup>3</sup> )	58,250	46,080
$g_c$ (lb·ft/lbf·s <sup>2</sup> )	32,000	32,000
G (lb/s·ft <sup>2</sup> )	1,325	0,744
G (lb/hr)	2856	1105
A (ft <sup>2</sup> )	0,599	0,412
<b>D (m)</b>	<b>0,262</b>	<b>0,217</b>

Es compara el valor del diàmetre obtingut per les dues zones de manera teòrica i amb el Hysys a la taula 12.7.4.14. Com a valor final, s'agafa el del Hysys ja que és el diàmetre més gran i, per tant, el més conservatiu.

**Taula 12.7.4.14.** Valors del diàmetre de la columna CD-301 obtinguts per les dues zones pel mètode teòric i amb el Hysys.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR	HYSYS
<b>D (m)</b>	<b>0,2620</b>	<b>0,2170</b>	<b>0,4572</b>

La columna de destil·lació CD-301 s'ha dissenyat a través del programa Hysys, que utilitza dades teòriques que té a la seva base de dades. A l'hora de construir la columna, és aconsellable treballar amb un marge de seguretat, consistent en realitzar un sobredimensionat de la columna, per tal d'obtenir la separació desitjada en cas que el seu comportament fos diferent al teòric. L'eficiència de separació està directament relacionada amb l'alçada de rebliment a la columna, per tant el sobredimensionament ve donat per un augment en l'alçada en el rebliment. Pel cas de les columnes, es decideix sobredimensionar en un 25% sobre l'alçada de rebliment, tal com s'indica a continuació.

$$h_{\text{rebliment}} = h_{\text{rebliment Hysys}} \cdot 1,25 = 3,157 \text{ m} \cdot 1,25 = \mathbf{3,946 \text{ m}}$$

S'ha de tenir en compte que al augmentar l'alçada de rebliment, la pèrdua de càrrega serà més gran. El Hysys dona la pèrdua de càrrega en funció de l'alçada, per tant es pot realitzar el càlcul considerant l'alçada sobredimensionada.

$$0,0955 \text{ KPa/m} \cdot 3,946 \text{ m} = \mathbf{0,3768 \text{ KPa}}$$

En aquest cas el Hysys no dona el número de peces i el pes del rebliment.

#### 12.7.4.3 Disseny mecànic

L'alçada de la columna de destil·lació no només ve donada per l'alçada necessària de rebliment, sinó que s'han de tenir en compte altre factors com l'espai superior i inferior necessari o el suport per al rebliment. A més, es divideix el rebliment en dos zones separades per un redistribuïdor, que permet millorar el funcionament de la torre. La divisió en dos zones també evita la compactació i la formació de camins preferencials.

La divisió es realitza de manera que s'obtenen dues zones dividides per l'aliment, per tant, es calcula l'alçada superior i inferior calculant l'alçada de rebliment corresponent a cada plat i multiplicant-la per la quantitat de plats que hi ha en cada zona. S'obté una alçada superior i inferior de la mateixa alçada ja que el plat de l'aliment es troba al mig. L'alçada és de 1,973 m.

A continuació es detallen els diferents elements que contindrà la columna al seu interior que no s'han tingut en compte en el disseny amb el Hysys, per fer-ho s'utilitza la guia donada per la casa "Saint-Gobain Norpro":

- **Distribuïdor de líquid**, s'utilitza el mateix que en la columna d'absorció AB-301, ja que segons la casa "Saint-Gobain Norpro" és vàlid per al diàmetre de treball de la columna CD-301. A l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, es troba l'explicació detallada d'aquest distribuïdor.
- **Redistribuïdor de líquid**, s'utilitza el mateix que en la columna d'absorció AB-301, ja que segons la casa "Saint-Gobain Norpro" és vàlid per al diàmetre de treball de la columna CD-301. A l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, es troba l'explicació detallada d'aquest redistribuïdor.
- **Reixetes de suport**, s'utilitzen els mateixos que en la columna d'absorció AB-301, ja que segons la casa "Saint-Gobain Norpro" són vàlids per al diàmetre de

treball de la columna CD-301. A l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, es troba l'explicació detallada de les reixetes de suport.

- **Limitadors de rebliment**, com en el cas de l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, s'ha de comprovar la necessitat de posar limitadors en la columna CD-301, utilitzant la taula de l'apartat 11.4.6.1.3 tal com indica la casa "*Saint-Gobain Norpro*".

La variació de pressió en la columna és de 0,1214 in. WC/ft i la densitat del rebliment de 62 lbs/ft<sup>3</sup>, per tant, no és necessari utilitzar limitadors de rebliment en la columna.

- **Boques d'home**, s'utilitzen les mateixes boques d'home pel que fa al model, quantitat i posició que en la columna d'absorció AB-301. A l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, es troba l'explicació detallada de les boques d'home utilitzades.

Cal tenir en compte l'espai necessari que s'ha de deixar entre les diferents parts de la columna, s'utilitzen els mateixos espais que en el cas de la columna d'absorció AB-301, detallats a l'apartat 11.4.6.1.3.

Per tant, es pot calcular l'alçada total del cos de la columna, tal com s'indica a continuació:

$$\begin{aligned}
 h_{cos} &= h_{\text{espai superior}} + h_{\text{distribuïdor}} + h_{\text{espai dist-rebl}} + \\
 &h_{\text{rebliment superior}} + h_{\text{suport}} + h_{\text{espai intermedi}} + h_{\text{redistribuïdor}} \\
 &+ h_{\text{espai dist-rebl}} + h_{\text{rebliment inferior}} + h_{\text{suport}} + h_{\text{espai inferior}} = \\
 &= 1000 \text{ mm} + 450 \text{ mm} + 750 \text{ mm} + 1973 \text{ mm} + 114 \text{ mm} + 1000 \text{ mm} + \\
 &+ 450 \text{ mm} + 750 \text{ mm} + 1973 \text{ mm} + 114 \text{ mm} + 2000 \text{ mm} = 10574 \text{ mm}
 \end{aligned}$$

Per tal d'abaratir costos es decideix fer la columna de 11 metres, ja que serà més fàcil i econòmic trobar un proveïdor que vengui la xapa d'aquesta longitud i no de 10,574 m. La longitud que falta s'afegeix a la dels espais buits superior per sobre del distribuïdor, intermedi per sobre del distribuïdor i inferior sota del limitador, ja que això no afectarà al funcionament de la columna. S'obté un espai de 1142 mm pel superior i intermedi i 2142 mm per l'inferior.

A continuació es dissenya la columna de destil·lació CD-301 mitjançant el codi ASME, es realitza el càlcul per a la carcassa cilíndrica i per als fons toricsfèrics.

### **Pressió de disseny**

La pressió de disseny per a la es calcula aplicant la norma següent:

$$Pressió\ de\ disseny = \max(1,1 \cdot P.\ operació, P.\ operació + 2atm)$$

$$Pressió\ de\ disseny = \max(28,6\ atm, 28atm) = 28,6\ atm$$

Per tant, sabent que la pressió d'operació és 26 atmosferes (disseny funcional amb el Hysys) es pot calcular la pressió de disseny.

Pressió operació = 26 atm.

Pressió de disseny = **28,6 atm.**

### **Temperatura de disseny**

En aquest cas, la temperatura de disseny be donada pel disseny funcional (Hysys). A continuació es presenten les temperatures d'operació per caps i cues de la columna:

Temperatura d'operació caps = 1,11 °C

Temperatura d'operació cues = 218,80 °C

Per tant,

$$Temperatura\ de\ disseny = \max(80^{\circ}C, T.\ operació, +15^{\circ}C)$$

Temperatura de disseny caps = **80,00 °C**

Temperatura de disseny cues = **233,80 °C**

### **Material**

Per decidir quin és el millor material per la columna CD-301 cal tenir en compte que es treballa amb HCl i la corrosió que aquest compost produeix és elevada, consultant la taula de la figura 12.7.4.12 s'escull **HASTELLOY® alloy B-2** amb una corrosió menor de 0,508mm/any.

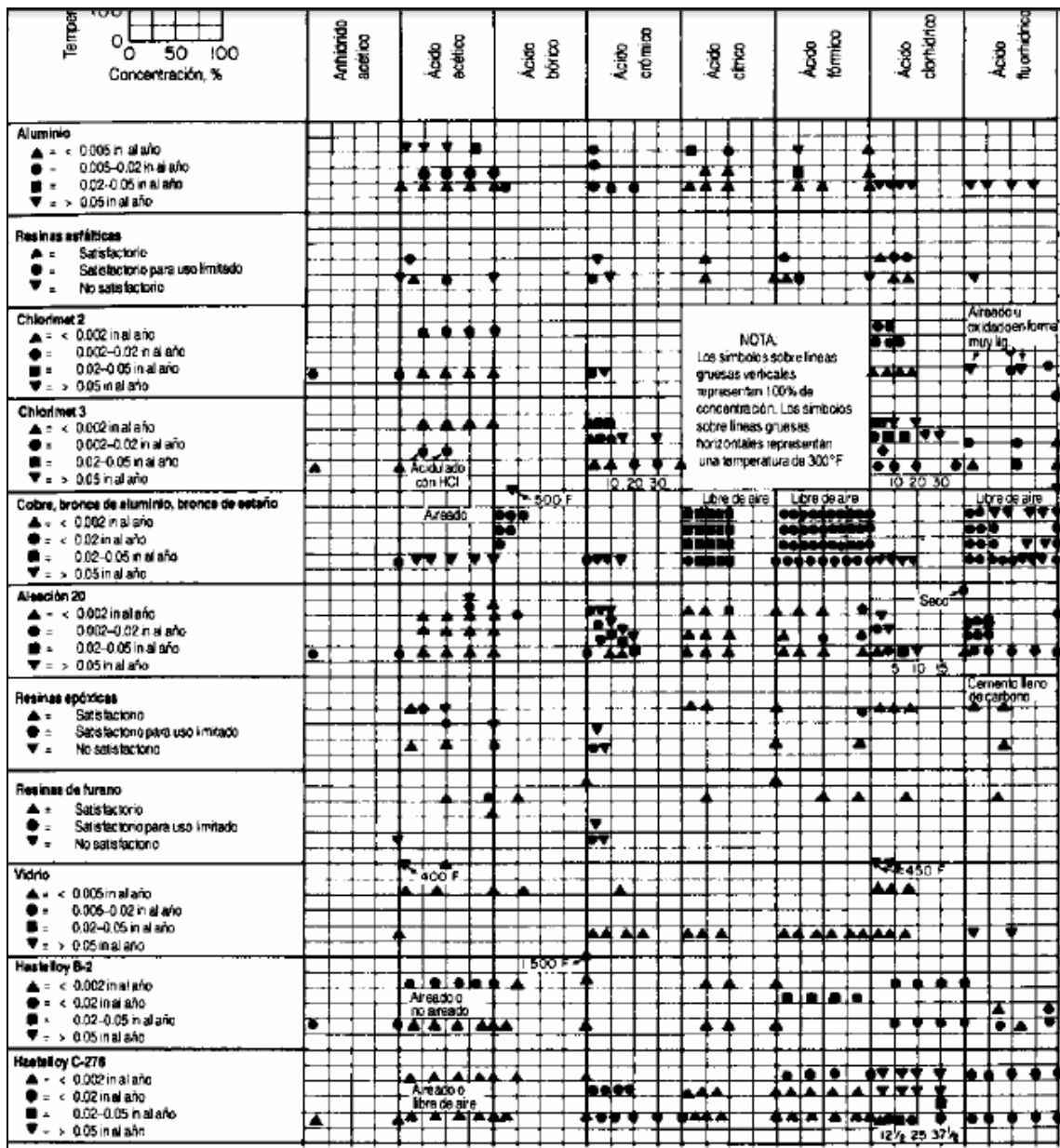


Figura 12.7.4.12 Dades detallades de corrosió en materials de construcció [Perrys Handbook]

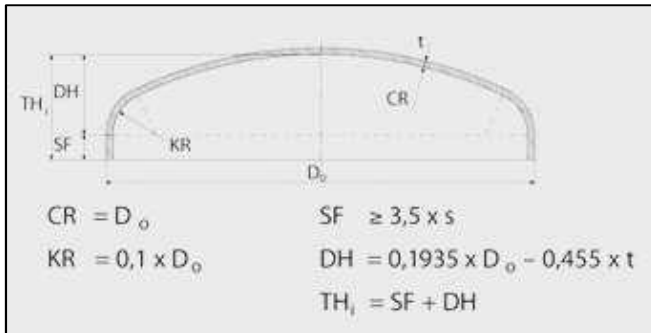
**Esponsor del fondo i el capçal. Càlcul a pressió interna**

Els tipus de fondos i capçals més utilitzats són el toriesfèric, l'hemisfèric i l'el·lipsoidal, la seva elecció depèn de les condicions d'operació i el cost econòmic, en aquest cas s'utilitza el toriesfèric.

S'hauria de realitzar el càlcul del fondo i el capçal de manera independent, ja que treballen a temperatures de disseny diferents. Com que la única diferencia ve donada per la tensió admissible del material que varia amb la temperatura, es decideix dissenyar per la temperatura més desfavorable, que s'obté en les cues de la columna

(temperatura més alta). Per tant, només fa falta realitzar el disseny d'un fondo, que serà exactament igual a l'altre.

Aquest fons ve definit pel radi de la corona (L) i el radi del colze (r) que es calculen respecte al diàmetre del cos donat pel Hysys, tal com indica la casa "Koenig-co" en la figura 12.7.4.13, extreta de la seva pàgina web.



**Figura 12.7.4.13.** Esquema del fons torisfèric per tal de determinar l'alçada del fons de la columna de destil·lació CD-301.  $s=t$ .

Per tant,

$$L = D = 457,2 \text{ mm}$$

$$r = 0,1 \cdot D = 0,1 \cdot 457,2 \text{ mm} = 45,72 \text{ mm}$$

$$\frac{L}{r} = 10$$

Per una relació  $L/r$  menor de  $16^{2/3}$  l'espessor es calcula amb l'equació 12.7.4.11.

$$t = \frac{P \cdot L \cdot M}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad \text{Equació 12.7.4.11}$$

on:

t = espessor del fondo (mm)

P = pressió de disseny del recipient (bar) = 28,6

M = factor que depèn de la relació  $L/r$ , en aquest cas igual a 1,54

E = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)

S = càrrega admissible del material (bar) = 7583,4 bar

L = radi de la corona (mm) = 457,2

El sobre espessor per corrosió del material és de 0,508mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobreesspessor serà 7,62 mm.

$C_1$  = marge per corrosió (mm) = 7,62 mm

$C_2$  = tolerància de fabricació (mm) = 10% de l'espessor

El resultat és de 10,10 mm, però donat que els espessors estàndards de xapa a Europa són: 3, 4, 5, 6, 8, 10, 12, 15, 20..., s'agafa un espessor dels fondos de 12 mm.

***espessor del fondo i el capçal = 12 mm***

### **Espessor del cos de la columna. Càlcul a pressió interna**

L'equació 12.7.4.12 permet trobar l'espessor del cos de la columna.

$$t_1 = \frac{P \cdot R_{int}}{S \cdot E - 0,6 \cdot P} + C \cdot A \quad \text{Equació 12.7.4.12}$$

on:

$t_1$  = espessor del cos (mm)

P = pressió de disseny del recipient (bar) = 28,6

$R_{int}$  = radi intern de la columna (mm) = 228,6

E = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)

S = càrrega admissible del material (bar) = 7583,4 bar

C.A = sobreesspessor (mm)

La tolerància de fabricació pel cas d'un cilindre és nul·la i el sobre espessor per corrosió del material és de 0,508mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobreesspessor serà 7,62 mm.

El resultat és de 8,64 mm, però donat que els espessors estàndards de xapa a Europa són: 3, 4, 5, 6, 8, 10, 12, 15, 20..., s'agafa un espessor del cos de 10 mm.

***espessor dels cos de la columna = 10 mm***

**Alçada dels fondo i el capçal**

Una vegada determinats els espessors del cos i els fondo i capçal es pot determinar l'alçada del fondo i el capçal per determinar l'alçada total de l'equip, tal com indica la casa "Koenig-co" en la figura anterior, extreta de la seva pàgina web.

$$DH = 0,1935 \cdot D_o - 0,455 \cdot t \quad \text{Equació 12.7.4.13}$$

$$SF = 3,5 \cdot s \quad \text{Equació 12.7.4.14}$$

$$TH = SF + DH \quad \text{Equació 12.7.4.15}$$

Es calcula l'alçada del fons torisfèric sense tenir en compte l'espessor de la xapa, tal com s'indica a continuació:

$$DH = 0,1935 \cdot 457,2 \text{ mm} - 0,455 \cdot 12 \text{ mm} = 83,01 \text{ mm}$$

$$SF = 3,5 \cdot 12 \text{ mm} = 42 \text{ mm}$$

$$TH = 42 \text{ mm} + 83,01 \text{ mm} = 125,01 \text{ mm}$$

Per tant, l'alçada de la columna sense l'espessor és de **11250 mm**.

**12.7.4.4 Pes de la columna****Pes de la columna buida**

Es calcula el volum del fondo i el capçal de la columna mitjançant l'equació 12.7.4.16.

$$Vi = 0,1 \cdot (D_{col})^3 \quad \text{Equació 12.7.4.16}$$

Per tant,

$$Vi = 0,1 \cdot (457,2 \text{ mm})^3 = 0,00956 \text{ m}^3$$

Com que es tenen un fondo i un capçal el volum és de 0,01912 m<sup>3</sup>.

Per calcular el pes dels capçals, es calcula el volum extern del fondo i el capçal, mitjançant l'equació 12.7.4.17.

$$Ve = 0,1 \cdot ((D_{col} + 2 \cdot t)^3) \quad \text{Equació 12.7.4.17}$$

Per tant,

$$Ve = 0,1 \cdot (457,2 \text{ mm} + 2 \cdot 12 \text{ mm})^3 = 0,01114 \text{ m}^3$$

Com que es tenen dos capçals el volum és de 0,02228 m<sup>3</sup>.



Per tant, la resta correspon al volum de la paret dels capçals:

$$V_{\text{paret}} = 0,02228 \text{ m}^3 - 0,01912 \text{ m}^3 = 0,00316 \text{ m}^3$$

Es calcula el volum intern i extern del cos de la columna, per tal de determinar el volum de paret.

$$V_i = \pi \cdot \left( \frac{D_{\text{col}}}{2} \right)^2 \cdot h = \pi \cdot \left( \frac{457,2 \text{ mm}}{2} \right)^2 \cdot 11000 \text{ mm} = 1,8059 \text{ m}^3$$

$$V_e = \pi \cdot \left( \frac{D_{\text{col}} + 2 \cdot t}{2} \right)^2 \cdot h = \pi \cdot \left( \frac{457,2 \text{ mm} + 2 \cdot 10 \text{ mm}}{2} \right)^2 \cdot 11000 \text{ mm} \\ = 1,9674 \text{ m}^3$$

$$V_{\text{paret}} = 1,9674 \text{ m}^3 - 1,8059 \text{ m}^3 = 0,1615 \text{ m}^3$$

Per tant, el volum total de la paret de la columna és de  $0,1647 \text{ m}^3$ .

Sabent que la densitat del Hastelloy B2 és de  $9220 \text{ Kg/m}^3$ , es pot calcular el pes de la columna buida, tal com s'indica a continuació:

$$0,1647 \text{ m}^3 \cdot \frac{9220 \text{ Kg}}{1 \text{ m}^3} = 1519 \text{ Kg}$$

Es considera que el pes dels elements interns és del 10 % del total del pes de l'equip buit, tal com s'indica a continuació.

$$\text{Pes elements interns} = 0,1 \cdot 1519 \text{ Kg} = 151,9 \text{ Kg}$$

En aquest cas el Hysys no dona el pes del rebliment i es calcula mitjançant el volum de rebliment i la densitat d'aquest trobada bibliogràficament, obtenint 644 Kg. Per tant es calcula el pes total de la columna buida:

$$\text{Pes buit} = 1519 \text{ Kg} + 151,9 \text{ Kg} + 644 \text{ Kg} = \mathbf{2315 \text{ Kg}}$$

### Pes de la columna plena d'aigua

Es calcula el volum de la columna sumant el volums dels capçals i el cos:

$$V_{\text{col}} = 0,01912 \text{ m}^3 + 1,8059 \text{ m}^3 = 1,8250 \text{ m}^3$$

Per tant, amb la densitat de l'aigua a la temperatura de  $25^\circ\text{C}$  i el pes de la columna buida es pot calcular el pes de la columna amb aigua:

$$Pes_{col\ aigua} = 2315\ Kg + 1,8250\ m^3 \cdot \frac{997,13\ Kg}{1\ m^3} = 4135\ Kg$$

### Pes de la columna en operació

A partir de la densitat mitjana del fluid d'operació es calcula el pes de la columna en operació:

$$Pes_{col\ operació} = 2315\ Kg + 1,8250\ m^3 \cdot \frac{443,88\ Kg}{1\ m^3} = 3125\ Kg$$

#### 12.7.4.5 Aïllament

Degut a que la temperatura d'operació de l'equip és superior a 60°C cal aïllar l'equip amb llana de vidre. Es realitza el càlcul pel capçal i pel fondo de manera independent amb l'equació 12.7.4.18. Se suposa una temperatura ambient de 15°C.

$$X = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{\Delta T}{D_{ext}}\right)^4} \quad \text{Equació 12.7.4.18}$$

on:

X = espessor de l'aïllant (cm)

$\Delta T$  = diferència de temperatura entre l'interior i l'exterior del recipient

$D_{ext}$  = diàmetre exterior del recipient (m)

*A la taula 12.7.4.15 es presenten els resultats obtinguts pel disseny a la part superior i inferior.*

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR
T disseny (°C)	80	233,8
$\Delta T$ (°C)	65	218,8
X (cm)	2,44	1,80

S'utilitza en els dos casos el més desfavorable i es decideix augmentar el valor obtingut pel doble per assegurar un bon aïllament.

$$X = 2,44\ cm \times 2 = 4,88\ cm$$

Pel que fa al cos de la columna, s'aïllarà amb el més desfavorable, és a dir, 4,88 cm.

Aquest aïllant quedarà recobert per una capa d'alumini per tal de protegir-lo de les inclemències meteorològiques.

Es calcula el volum de l'aïllant calculant el volum als fondos i al cos, els resultats es presenten a la taula 12.7.4.16.

**Taula 12.7.4.16.** Càlcul del volum d'aïllant necessari en la columna CD-301

Volum aïllant capçal (m <sup>3</sup> )	0,0083
Volum aïllant fondo (m <sup>3</sup> )	0,0083
Volum aïllant cos (m <sup>3</sup> )	0,8888
<b>Volum aïllant total (m<sup>3</sup>)</b>	<b>0,9054</b>

## 12.7.5 Columna de destil·lació CD-302

### 12.7.5.1 Disseny funcional

Es dissenya aquesta torre de destil·lació amb la finalitat de recuperar el fosc que no ha reaccionat al reactor R-301, els corrents tractats són la sortida líquida de l'absorbidor AB-301 i el residu de la columna de destil·lació CD-301. Com en el cas de la columna CD-301, la temperatura d'ebullició de la mescla és massa baixa i això fa inviable tenir un condensador a una temperatura tant baixa, en concret de -19°C. Es decideix treballar a 3 atmosferes per poder tenir una temperatura d'ebullició de 12°C. Aquest fet comporta una sèrie d'operacions prèvies a l'entrada de la columna per tal de tenir l'aliment a aquesta pressió. Primerament, la sortida líquida de la columna CD-301 s'ha de fer passar per una vàlvula per tenir-la a 3 atm, fent que la temperatura baixi i es formi un líquid que s'ha de separar en un tanc. La sortida líquida d'aquest tanc es barreja amb la sortida líquida del absorbidor, que prèviament s'ha fet passar per una bomba per pujar-li la pressió fins a 3 atm. Tant el corrent líquid com el gas es fan entrar al mateix plat de la columna CD-302.

**Disseny teòric**

Es realitza el disseny teòric de la columna mitjançant el mètode de “Shorcut “ teòric, que utilitza “Fenske”, “Underwood” i la correlació de “Gilliand” per trobat el número d’etapes i l’etapa de l’aliment.

Prèviament, són necessàries les volatilitats relatives dels diferents compostos respecte el component clau pesat, és a dir, el MCC. La volatilitat relativa d’un compost ve definida per l’equació 12.7.5.1. Com que la volatilitat depèn de la temperatura, s’utilitzarà una volatilitat relativa mitjana a la temperatura de l’aliment.

$$\alpha_{i,j} = \frac{k_i}{k_j} \quad \text{Equació 12.7.5.1}$$

on,

$\alpha_{i,j}$ : volatilitat relativa del component i respecte del component j

$k_i$ : constant d’equilibri del component i

$k_j$ : constant d’equilibri del component j (component de referència – heavy key)

S’extreuen les constants d’equilibri de cada compost amb el Hysys a la temperatura mitjana de l’aliment líquid i gas, obtenint les k a partir del corrent obtingut mitjançant la mescla d’aquestes dues en un “Mixer”. Els resultats es presenten a la taula 12.7.5.1.

**Taula 12.7.5.1.** Constants d’equilibri per cada compost a la temperatura i pressió d’entrada de l’aliment.

Compost	k
MCC	0,902
HCl	26,860
Toluè	0,595
Fosgè	6,032

Per tant, a partir d’aquestes es poden calcular les volatilitats relatives de cada compost respecte el MCC, els resultats es presenten a la taula 12.7.5.2.

**Taula 12.7.5.2** Volatilitats relatives respecte el MCC a la temperatura i pressió d’entrada a la columna CD-302.

Compost	$\alpha_{i,MCC}$
MCC	1,000
HCl	29,782
Toluè	0,659
Fosgè	6,688

Es fixa la fracció recuperada dels compostos claus que es vol obtenir en el destil·lat i en el residu, tal com s'indica a continuació.

$$FR_{MCC,B}=0,9999$$

$$FR_{fosgè,D}=0,9999$$

Mitjançant l'equació de Fenske, presentada a continuació, es calcula el número mínim d'etapes necessàries per a la separació desitjada.

$$N_{min} = \frac{\ln\left(\frac{FR_{LK,D} \cdot FR_{HK,B}}{(1-FR_{LK,D}) \cdot (1-FR_{HK,B})}\right)}{\ln(\alpha_{LK-HK})} \quad \text{Equació 12.7.5.2}$$

on,

$FR_{LK,D}$ : fracció recuperada del clau lleuger en el destil·lat

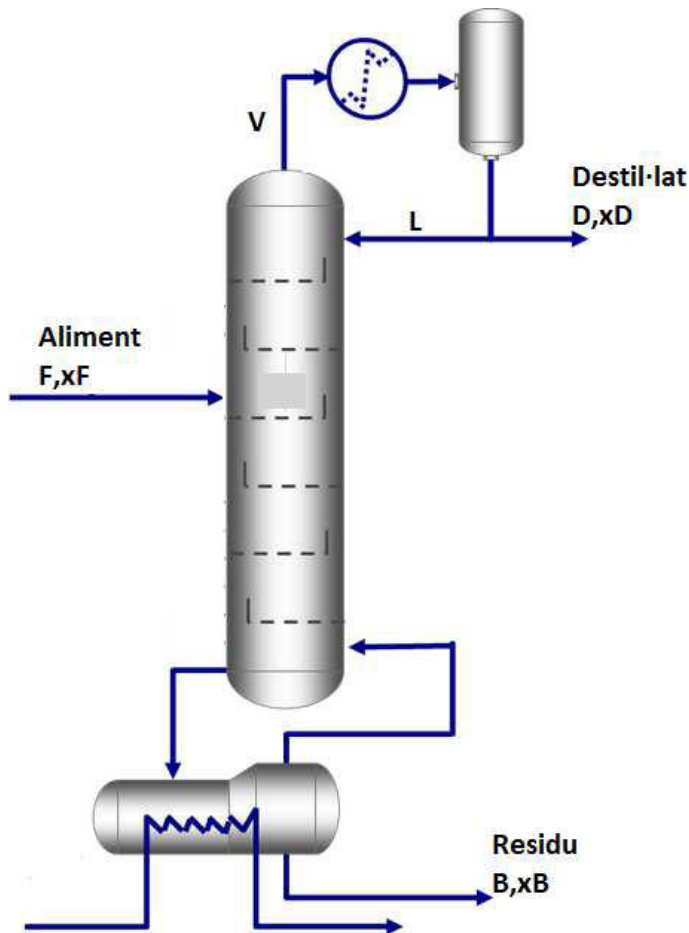
$FR_{HK,B}$ : fracció recuperada del clau pesat en el refinat

$(\alpha_{LK-HK})$ : volatilitat relativa del component clau lleuger respecte del component clau pesat

Per tant,

$$N_{min} = \frac{\ln\left(\frac{0,9999 \cdot 0,9999}{(1 - 0,9999) \cdot (1 - 0,9999)}\right)}{\ln(6,688)} = 9,69 \approx 10 \text{ etapes d'equilibri}$$

En aquest moment es fa necessari realitzar un balanç de matèria a la columna, mitjançant la figura 12.7.5.1.



**Figura 12.7.5.1.** Esquema general de la columna de destil·lació CD-302.

El balanç de matèria es presenta a continuació:

- Balanç de matèria global  
 $F=B+D$   
 $V=L+D$
- Balanç de matèria pel component  $i$   
 $F \cdot x_{F,i} = B \cdot x_{B,i} + D \cdot x_{D,i}$

S'ordenen els components per la seva volatilitat (de  $k$  més alta a més baixa) en la taula 12.7.5.3 i es resol el balanç de matèria considerant que els no claus lleugers surten totalment per caps i els no claus pesats surten totalment per baix.

**Taula 12.7.5.3.** Balanç de matèria a la columna CD-302 una vegada imposades les fraccions recuperades dels components claus.

	Compost	k	z <sub>i</sub> ,F	F·z <sub>i</sub> ,F	x <sub>i</sub> ,D	D·x <sub>i</sub> ,D	x <sub>i</sub> ,B	B·x <sub>i</sub> ,B
<b>LNK</b>	HCl	26,8600	0,4630	0,1260	0,0546	0,1260	0,0000	0,0000
<b>LK</b>	Fosgè	6,0320	0,1025	2,1830	0,9450	2,1828	0,0000	0,0002
<b>HK</b>	MCC	0,9019	0,0515	10,0610	0,00044	0,0010	0,2869	10,0600
<b>HNK</b>	Toluè	0,5945	0,3830	25,0000	0,0000	0,0000	0,7131	25,0000
			<b>F</b> <b>(kmols/h)</b>	<b>37,3700</b>	<b>D</b> <b>(kmols/h)</b>	<b>2,3098</b>	<b>B</b> <b>(kmols/h)</b>	<b>35,0602</b>

Una vegada resolt el balanç de matèria, es calcula el (L/D)<sub>min</sub> mitjançant el mètode de Underwood, tal com s'indica a continuació:

$$(\Delta V)_F = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i \cdot F \cdot z_{i,F}}{\alpha_i - \emptyset} \quad \text{Equació 12.7.5.3}$$

On s'imposa  $(\Delta V)_F = 0$  i es troba el valor de  $\emptyset$ , resolent l'equació 12.7.5.4.

El valor de  $\emptyset$  trobat és de 4,586; a partir d'aquest valor es calcula el valor de  $V_{min}$  mitjançant l'equació 12.7.5.4.

$$(V)_{min} = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i \cdot D \cdot x_{i,D}}{\alpha_i - \emptyset} \quad \text{Equació 12.7.5.4}$$

Troba un valor de  $V_{min} = 7,034$  Kmols/h.

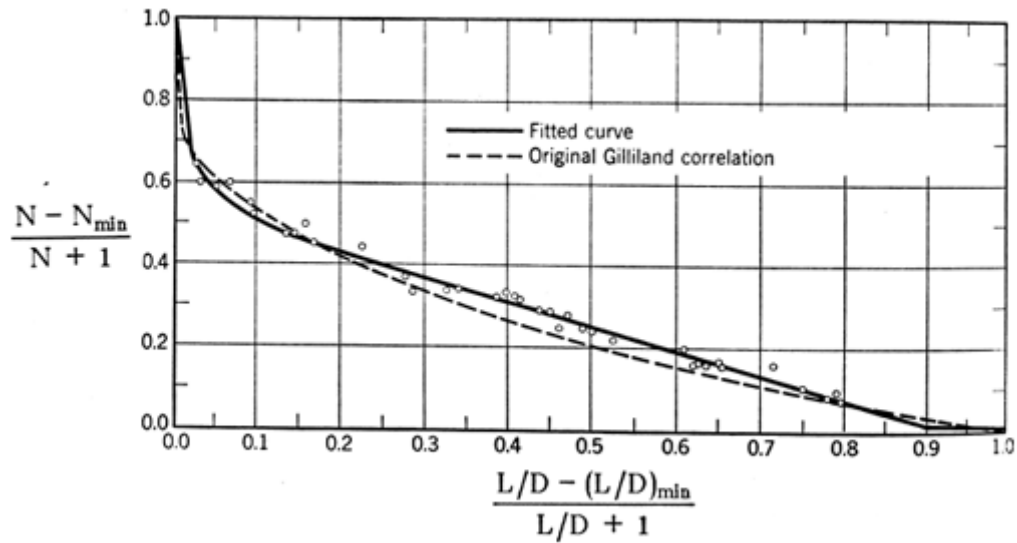
A partir del valor de  $V_{min}$  es calcula (L/D)<sub>min</sub>, tal com s'indica en l'equació 12.7.5.5.

$$\left(\frac{L}{D}\right)_{min} = \frac{(V)_{min}}{D} - 1 \quad \text{Equació 12.7.5.5}$$

Troba un valor de  $\left(\frac{L}{D}\right)_{min} = 2,0453$

Considerant que  $\left(\frac{L}{D}\right) = 1,2 \cdot \left(\frac{L}{D}\right)_{min} = 2,4544$

Sabent el valor de  $\left(\frac{L}{D}\right)_{min}$  i  $\left(\frac{L}{D}\right)$  es passa a utilitzar la correlació de Gilliland, presentada a la figura 12.7.5.2, que permet obtenir el número d'etapes d'equilibri necessàries a la columna.



**Figura 12.7.5.2** Gràfic de la correlació de Gilliland per al càlcul del número d'etapes necessàries en la columna CD-302.

Sabent,

$$\frac{\frac{L}{D} - \left(\frac{L}{D}\right)_{\min}}{\frac{L}{D} + 1} = \frac{2,4544 - 2,0453}{2,4544 + 1} = 0,118$$

Es troba el valor de les ordenades utilitzant "Original Gilliland correlation":

$$\frac{N - (N)_{\min}}{N + 1} = 0,50$$

Per tant, es troba un valor de **N de 21 etapes**.

Per trobar l'etapa de l'aliment mínima s'utilitza l'equació 12.7.5.6.

$$N_{F,\min} = \frac{\ln\left(\frac{\left(\frac{x_{LK}}{x_{HK}}\right)_D}{\frac{z_{LK}}{z_{HK}}}\right)}{\ln(\alpha_{LK-HK})} \quad \text{Equació 12.7.5.6}$$

on,

$z_{LK}$ : fracció molar del component clau lleuger a l'aliment

$z_{HK}$ : fracció molar del component clau pesat a l'aliment



Es resol l'equació 12.7.5.6:

$$N_{F,min} = \frac{\ln\left(\frac{0,94500}{\frac{0,00044}{\frac{0,1025}{0,0515}}}\right)}{\ln(6,688)} = 3,675 \approx \text{Etapa 4}$$

Per trobar l'etapa de l'aliment s'utilitza l'equació 12.7.5.7, presentada a continuació.

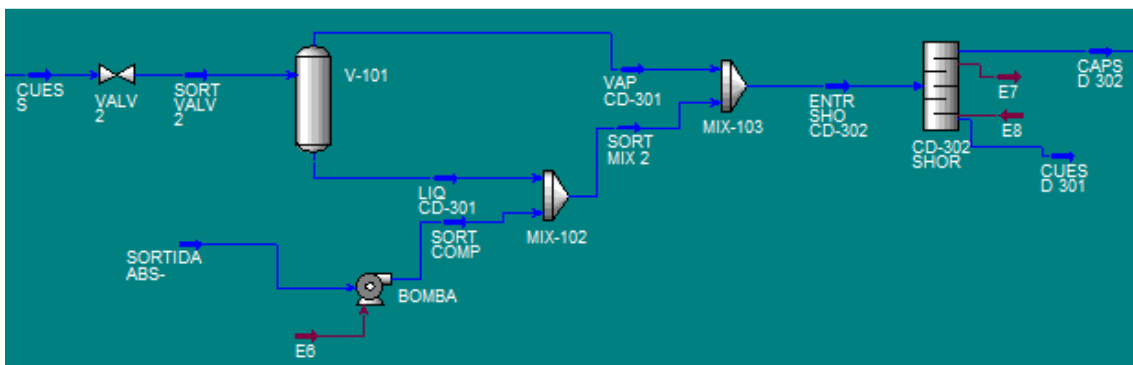
$$\frac{N_{F,min}}{N_{min}} = \frac{N_F}{N} \quad \text{Equació 12.7.5.7}$$

Per tant,

$$N_F = \frac{N_{F,min}}{N_{min}} \cdot N = \frac{4}{10} \cdot 21 = 8,4 \approx \text{Etapa 9}$$

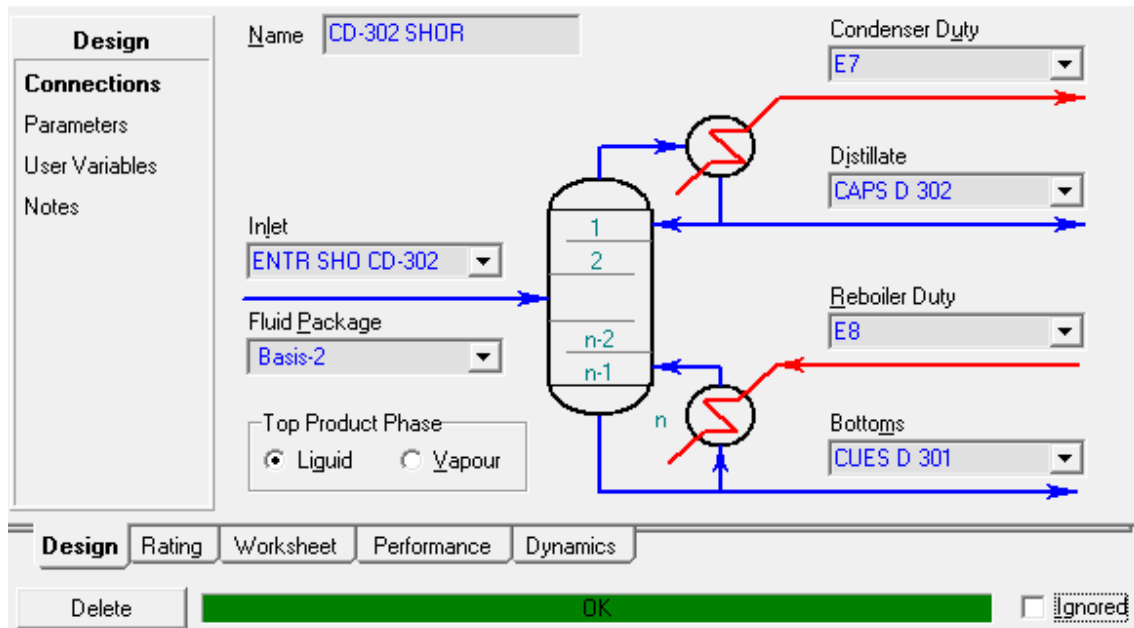
### Disseny amb AspenTech "Hysys v 7.3"

Es dissenya la columna de destil·lació CD-302 pel mètode "Shortcut Column", s'imposa una fracció molar del component clau pesat per caps i del component clau lleuger per cues molt baixa (0,0001), ja que es vol obtenir una separació molt alta per separar la màxima quantitat de fosc. A la figura 12.7.5.3 es presenta l'esquema general utilitzat en el Hysys per realitzar el disseny de la columna de destil·lació CD-302, s'inclouen les operacions prèvies a la destil·lació. En aquest cas, com aquest subprograma no permet més d'una entrada a la columna, es fa una barreja just abans d'entrar del corrent gasós i líquid.



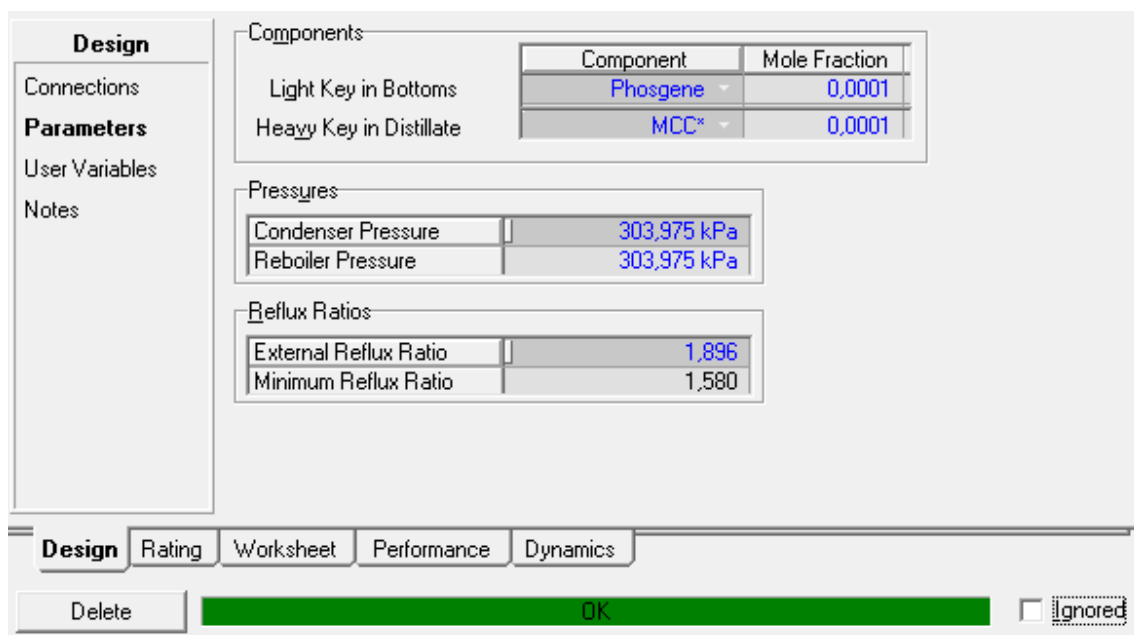
**Figura 12.7.5.3** Esquema general utilitzat en el Hysys pel disseny de la columna CD-302 pel mètode de "Shortcut Column"

A la figura 12.7.5.4 es presenta la pantalla principal utilitzada en el Hysys pel disseny de la columna CD-302 pel mètode de “Shortcut Column”.



**Figura 12.7.5.4.** Pàgina principal del disseny de la columna de destil·lació CD-302 pel mètode de “Shortcut Column”.

A la figura 12.7.5.5 es presenten les condicions imposades en el Hysys per obtenir la separació desitjada. S’imposa un valor de relació de reflux 1,2 vegades més gran que la mínima.



**Figura 12.7.5.5** Condicions imposades per al disseny del “Shortcut Column” en la columna CD-302.

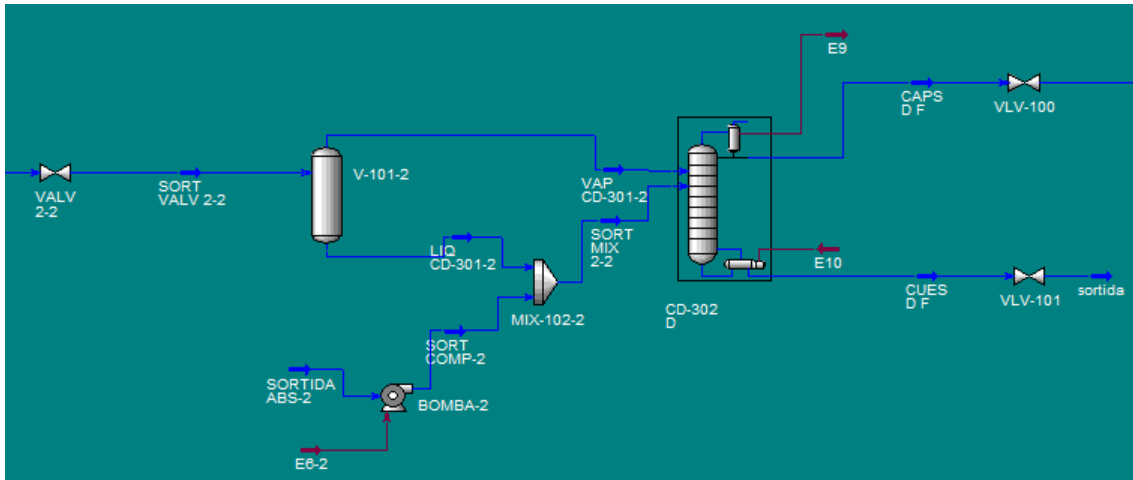
Una vegada imposades les condicions, s'obté el disseny de la columna amb el mètode de "Shorcut Column" amb els paràmetres presentats a la taula 12.7.5.4.

**Taula 12.7.5.4** Paràmetres de disseny obtinguts amb el mètode de "Shorcut column" per a la columna de destil·lació CD-302.

<b>Plats</b>	
Número mínim de plats	7,666
Número de plats	18,029
Plat de l'aliment	12,722
<b>Temperatures</b>	
Condensador (°C)	17,47
Reboiler (°C)	148,60
<b>Cabals</b>	
Rectificació vapor (Kmols/h)	6,686
Rectificació líquid (kmols/h)	4,377
Stripping vapor (kmols/h)	5,528
Stripping líquid (kmols/h)	40,783
Calor condensador (KJ/h)	-162323,10
Calor reboiler (KJ/h)	236422,96

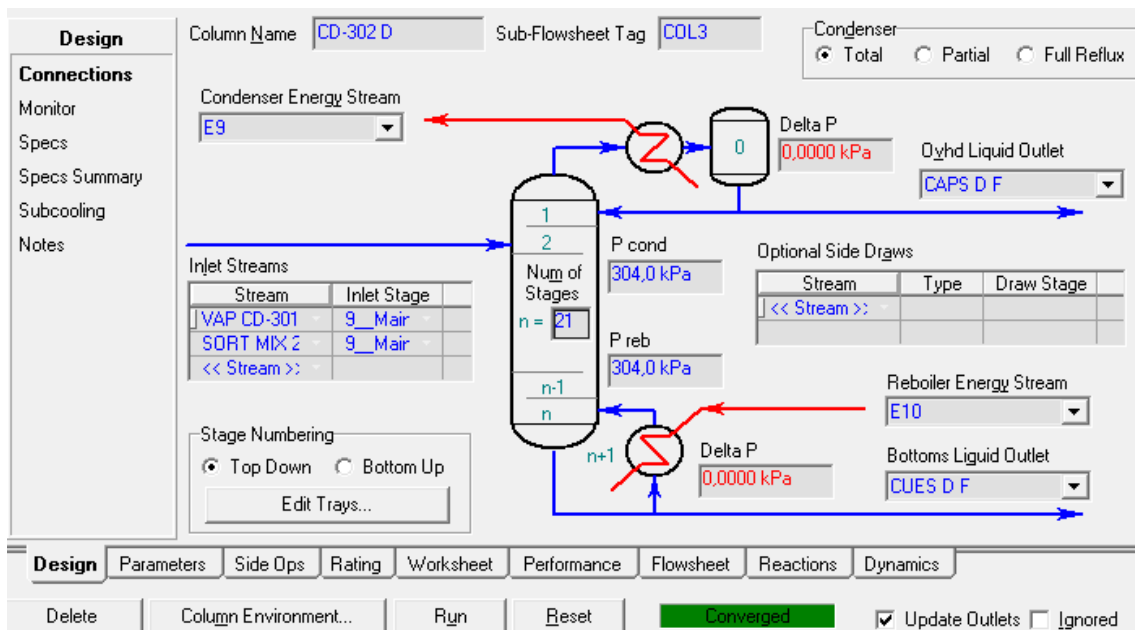
Un cop feta l'aproximació amb el mètode "ShortCut Column" es realitza el mètode rigorós "Distillation Column". Amb els paràmetres donats pel mètode aproximat el Hysys no és capaç de resoldre la columna i es fa necessari canviar alguns dels paràmetres del disseny, com són la relació de reflux i el número de plats. Per arribar a la separació desitjada es decideix augmentar la relació de reflux fins a 3. Encara que amb 19 etapes ja s'obté la separació desitjada s'imposen 21 per assegurar el funcionament de la columna ja que és el valor trobat pel mètode teòric i aquest és més restrictiu. Com a etapa de l'aliment s'escull el valor de 9 trobat teòricament.

A la figures següents es presenta l'esquema general utilitzat en el Hysys per realitzar el disseny de la columna de destil·lació CD-302, s'inclouen les operacions prèvies a la destil·lació.



**Figura 12.7.5.6** Esquema general utilitzat en el Hysys pel disseny de la columna CD-302 pel mètode de “Distillation Column”

A la figura 12.7.5.7 es presenta la pantalla principal del disseny realitzat amb el Hysys amb el mètode “Distillation Column”.



**Figura 12.7.5.7.** Pàgina principal del disseny de la columna de destil·lació CD-302.

Si el disseny de la columna és correcte i el Hysys ha trobat una solució, s’observa una icona en verd on diu “Converged”. A les taules 12.7.5.4 i 12.7.5.5 es presenten les condicions de treball i les composicions dels corrents respectivament, per tant, el balanç de matèria a la columna CD-302.

**Taula 12.7.5.4.** *Condicions de treball a la columna d'absorció CD-302. Balanç de matèria.*

Corrent	Entrada gasosa	Entrada líquida	Sortida caps	Sortida cues
<b>Fracció vapor</b>	0,9676	0,0000	0,0000	0,0000
<b>Temperatura (°C)</b>	138,3000	96,1300	11,8200	148,4000
<b>Pressió (Kpa)</b>	304,0000	304,0000	304,0000	304,0000
<b>Cabal molar (Kmols/h)</b>	6,1170	31,4500	2,3120	35,2500
<b>Cabal màssic (Kg/h)</b>	576,5000	2906,0000	220,7000	3262,0000
<b>Cabal de líquid (m<sup>3</sup>/h)</b>	0,6016	3,5320	0,1619	3,9710
<b>Entalpia molar (KJ/Kmol)</b>	-39210,00	-4,28E+04	-238500,00	-25250,00
<b>Entropia molar</b>	162,70	63,66	214,10	91,21
<b>Flux de calor (KJ/h)</b>	-239800,00	-1,35E+06	-551300,00	-890200,00

**Taula 12.7.5.5** *Composicions dels cabals a la columna d'absorció CD-302.*

Corrent	Entrada gasosa	Entrada líquida	Sortida caps	Sortida cues
<b>MCC</b>	0,0999	0,2971	0,0000	0,2824
<b>HCl</b>	0,0000	0,0041	0,0555	0,0000
<b>MIC</b>	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
<b>Toluè</b>	0,6098	0,6858	0,0000	0,7176
<b>Fosgè</b>	0,2903	0,0130	0,9445	0,0000
<b>1-naftol</b>	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
<b>Carbaril</b>	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

S'obté una columna de 21 etapes d'equilibri, amb l'etapa de l'aliment a la 9. La relació de reflux s'ha hagut d'augmentar fins a 3 per obtenir la separació desitjada. Com s'observa amb una columna d'aquestes característiques s'aconsegueix la separació total de fosgè, obtenint d'aquesta manera un destil·lat amb tot l'HCl i el fosgè que entra, i un residu en absència de fosgè i la totalitat del cabal molar de MCC i toluè. Una vegada dissenyada la columna, el programa Hysys permet obtenir diferents gràfics, com temperatura, caudal i composició en funció del plat d'equilibri. Aquests es presenten a les figures següents:

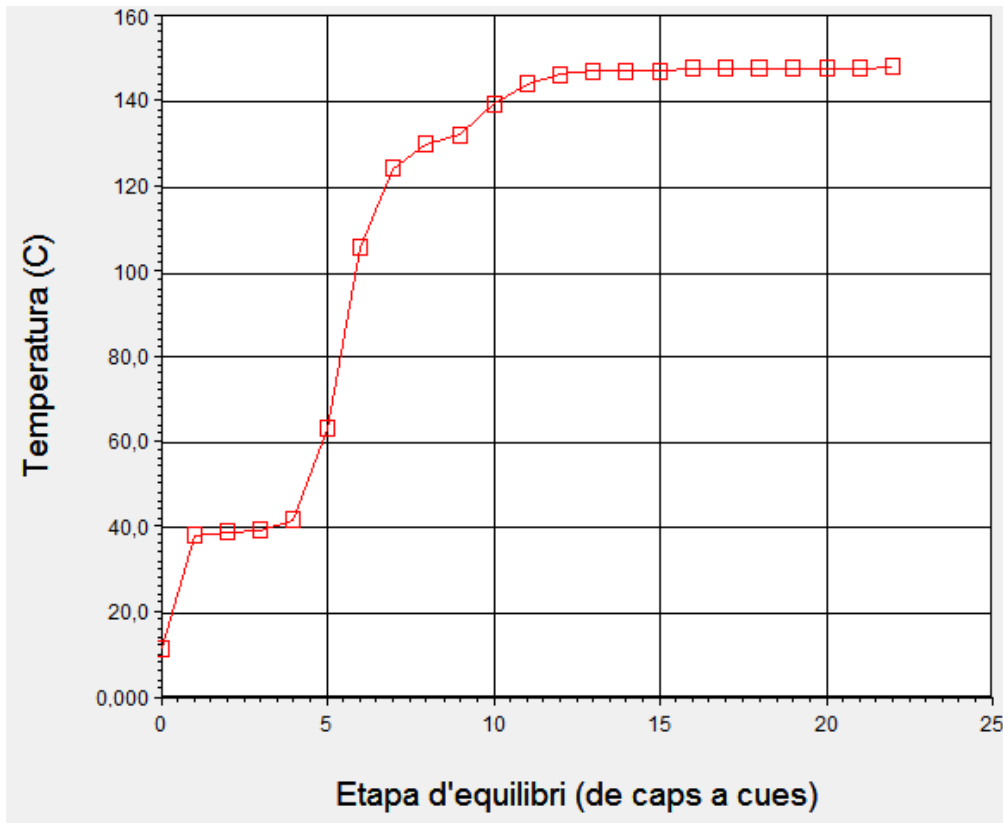


Figura 12.7.5.8. Temperatura en funció del número d'etapa d'equilibri a la columna de destil·lació CD-302.

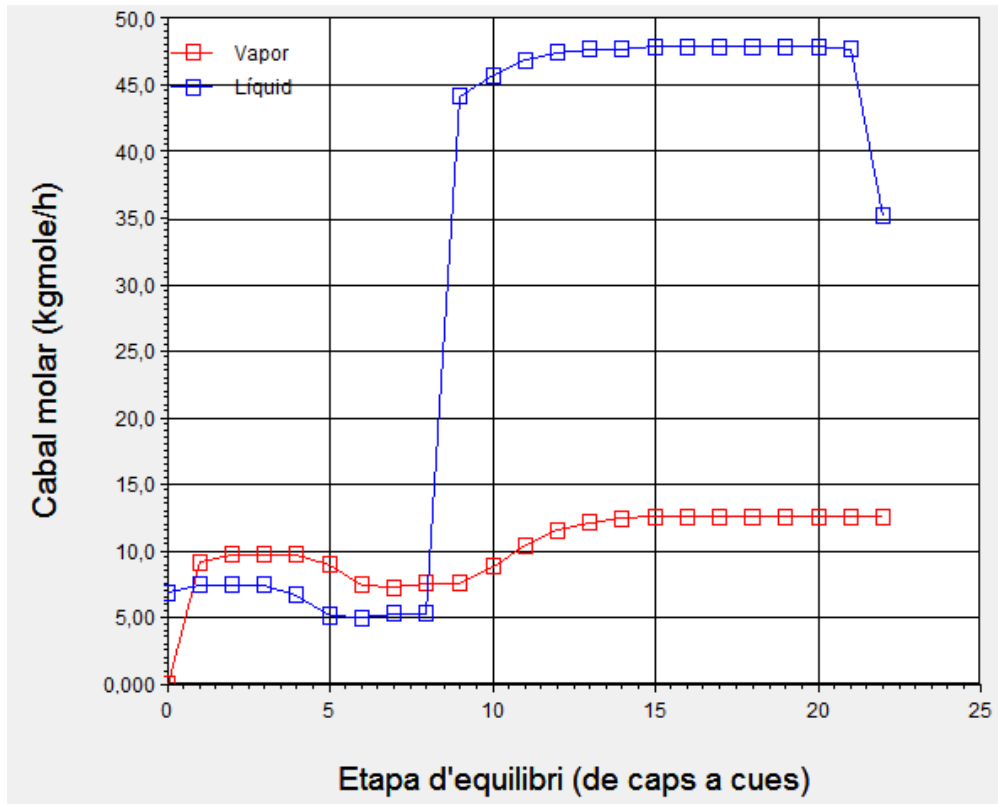
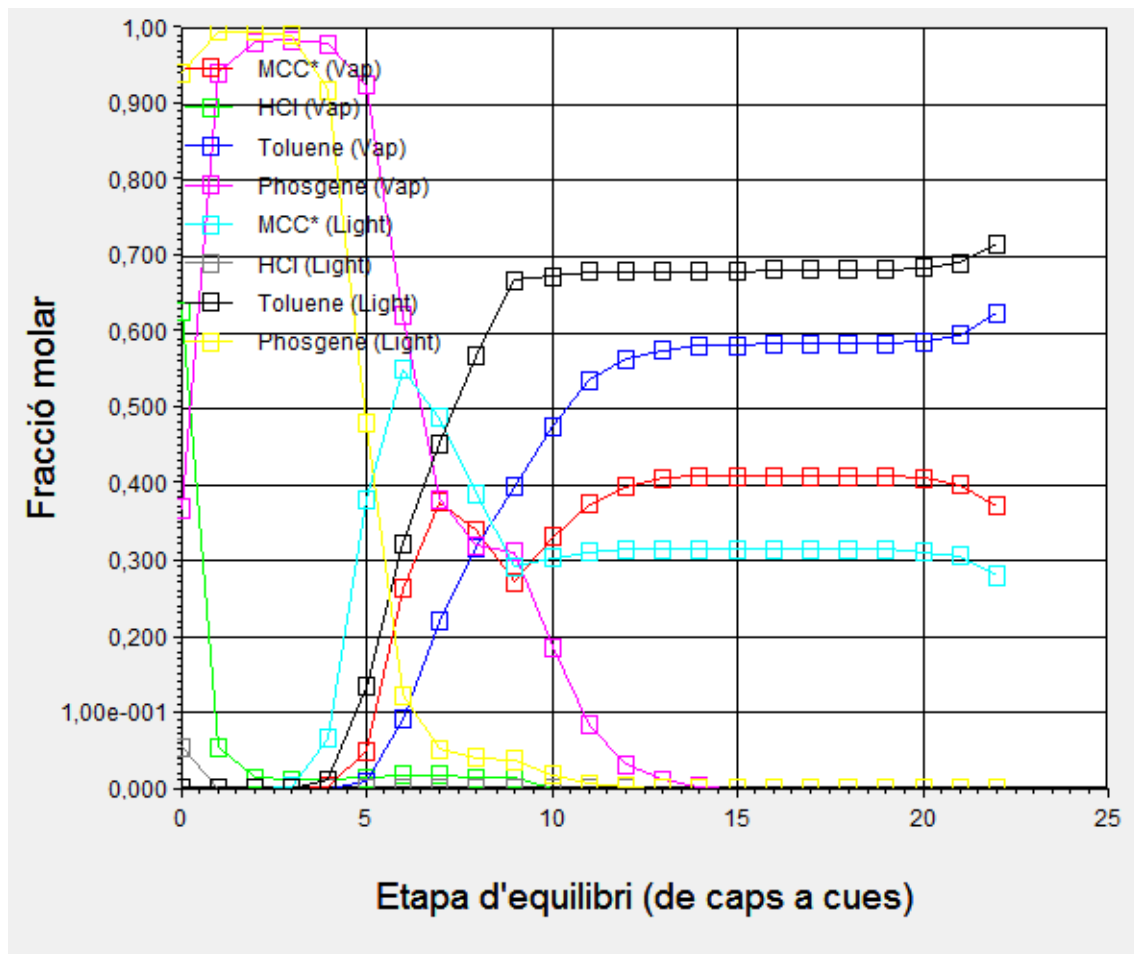


Figura 12.7.5.9. Cabal molar del vapor i del líquid en funció del número d'etapa d'equilibri a la columna de destil·lació CD-302.



**Figura 12.7.5.19** Composició dels diferents components en funció del número d'etapa d'equilibri a la columna de destil·lació CD-302.

Per tant, s'ha utilitzat el disseny definitiu amb el Hysys encara que utilitzant el valors de les etapes d'equilibri i etapa de l'aliment teòriques trobades, ja que eren més conservatives que el disseny amb el Hysys.

### 12.7.5.2 Dimensionat

Una vegada realitzats tots els càlculs es realitza el dimensionat de la columna. Per defecte, el mètode rigorós treballa amb un diàmetre de 1,5 metres. Com a espai entre plats ha calculat 0,55 metres, un número lògic en les columnes de rectificació. Per realitzar un dimensionat més acurat, el Hysys conté una aplicació anomenada "Tray Sizing".

Aquesta aplicació permet calcular el diàmetre i alçada de la columna tant si es fa de plats com si es fa de rebliment. En aquest cas, és preferible utilitzar la columna de rebliment, ja que el diàmetre calculat segons el "Tray sizing" és de 0,6096 metres. A més, les columnes de rebliment són més barates i treballen millor amb fluids corrosius.

El Hysys permet escollir el tipus de rebliment i el material. Se sap que a mesura que el diàmetre del rebliment és més gran l'alçada de la columna augmenta. El material més adequat per la columna i el rebliment és el HASTELLOY® alloy B-2, ja que permet treballar amb compostos corrosius, com en el cas de la columna CD-302. Com que el Hysys no conté aquest compost a la seva base de dades, s'agafa rebliment de metall.

Es decideix utilitzar Raschig Rings i s'escull la seva mida segons la taula 12.7.5.6.

**Taula 12.7.5.6** Mida del rebliment Raschig Rings segons el diàmetre de la columna.

Mida del rebliment	Diàmetre de la columna (m)
1/2" - 5/8"	0,1524 - 0,3048
5/8" - 1"	0,3048 - 0,4572
1" - 1 <sup>1/2</sup> "	0,4572 - 0,6096
1 <sup>1/2</sup> " - 2"	0,6096 - 1,2192
2" - 3"	>1,2192

Es decideix utilitzar Raschig Rings d'un diàmetre de polzada distribuït de manera aleatòria. A la figura 12.7.5.20 es presenta el rebliment utilitzat en la columna CD-302.



**Figura 12.7.5.20.** Rebliment utilitzat en la columna CD-302. Raschig Rings.

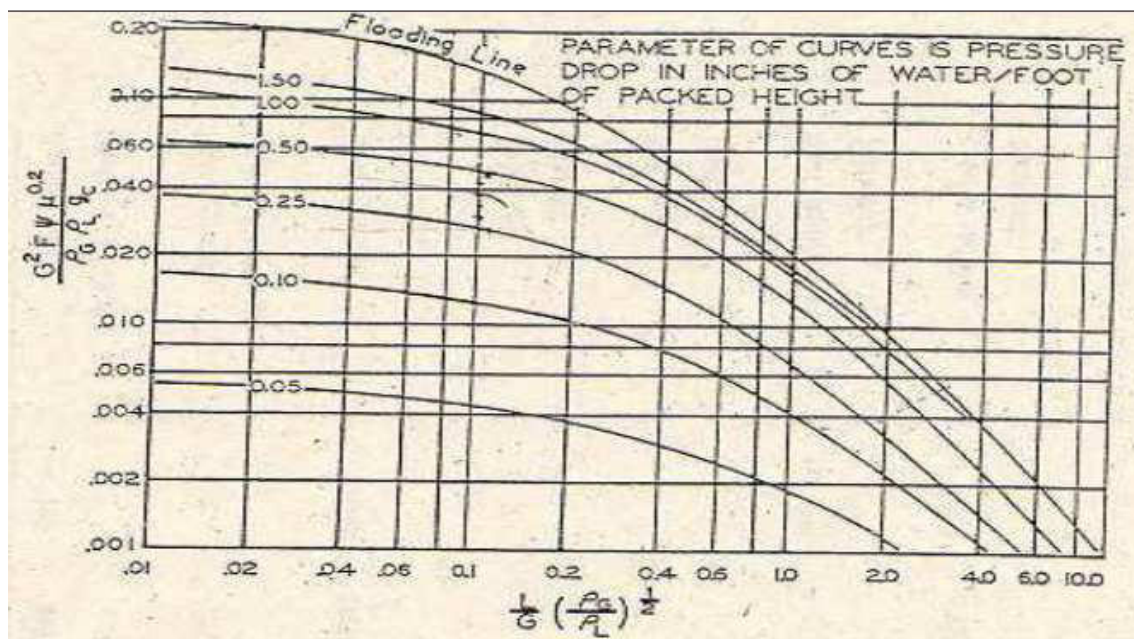
A la taula 12.7.5.7 es presenten els paràmetres del disseny del Hysys per la columna CD-302.



**Taula 12.7.5.7** Paràmetres de disseny del Hysys del dimensionat de la columna CD-302.

Elements interns de la columna	
Tipus de rebliment	Raschig Rings (metall) 1 polzada (Glitsch)
Correlació inundació	SLEv73
Correlació HETP	Frank
Número de peces de rebliment	-
Pes del rebliment (Kg)	-
Estimació del cost del rebliment (\$)	-
Geometria de la columna	
Diàmetre (m)	0,6096
Àrea transversal (m <sup>2</sup> )	0,2919
Alçada del rebliment (m)	9,051
Resultats hidràulics	
Inundació màxima (%)	46,61
Pèrdua de càrrega (Kpa)	0,7446
Pèrdua de càrrega per metre de rebliment (Kpa/m)	0,0823
Velocitat del gas (m <sup>3</sup> /h·m <sup>2</sup> )	1069
Velocitat del gas (m/s)	0,2968

Per comprovar els resultats obtinguts amb el Hysys, es comprova el diàmetre de la columna obtingut mitjançant el mètode teòric que utilitza el gràfic d'Eckert, presentat a la figura 12.7.5.21.

**Figura 12.7.5.21.** Gràfic d'Eckert

Per poder trobar el diàmetre, primerament es troba el valor de l'eix de les abscisses, definit per l'equació 12.7.5.8.

$$\frac{L}{G} \cdot \left(\frac{\rho_G}{\rho_L}\right)^{1/2} \quad \text{Equació 12.7.5.8}$$

on,

L: cabal total de líquid (kmols/h)

G: cabal total de gas (kmols/h)

$\rho_G$ : densitat del gas (lb/ft<sup>3</sup>)

$\rho_L$ : densitat del líquid (lb/ft<sup>3</sup>)

Com que el cabals de líquid i de gas no són constants en la columna es calcula el diàmetre en dos parts de la columna, la part superior i la part inferior, utilitzant els cabals donats pel Hysys. A la taula 12.7.5.8 es presenten els paràmetres de l'equació 12.7.5.8 utilitzats per cada zona on es calcula el diàmetre.

**Taula 12.7.5.8.** Paràmetres de l'equació 12.7.5.8 utilitzats per cada zona on es calcula el diàmetre.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR
L (kmols/h)	7,487	47,833
G (kmols/h)	9,799	12,581
$\rho_G$ (lb/ft <sup>3</sup> )	0,716	0,502
$\rho_L$ (lb/ft <sup>3</sup> )	81,810	43,020

A la taula 12.7.5.9 es presenta el valor de les abscisses per les dues zones calculades amb els valors dels paràmetres de la taula 12.7.5.8.

**Taula 12.7.5.9.** Valor de les abscisses pel gràfic d'Eckert.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR
Valor abscisses (Eckert)	0,0715	0,4106

Considerant que la columna treballa a un 50% de la seva velocitat d'inundació s'arriba a una valor de l'eix d'ordenades, i mitjançant l'equació 12.7.5.9 es calcula el valor del cabal del gas en unitats de cabal dividides per l'àrea de pas, que permet obtenir aquesta última.

**Taula 12.7.5.10.** Valor de les ordenades pel gràfic d'Eckert.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR
Valor d'ordenades (Eckert)	0,055	0,028

Mitjançant l'equació 12.7.5.9 es pot calcular el valor de G per cada zona.

$$\frac{G^2 \cdot F \cdot \varphi \cdot \mu^{0,2}}{\rho_G \cdot \rho_L \cdot g_C} \quad \text{Equació 12.7.5.9}$$

on:

G: flux de gas (lb/s·ft<sup>2</sup>)

F: factor d'ompliment

$\varphi$  : relació entre la densitat de l'aigua i la del líquid

$\mu$ : viscositat del líquid (cP)

$g_C$ : constant de gravetat (32lb·ft/lb<sub>f</sub>·s<sup>2</sup>)

Mitjançant l'equació 12.7.5.10 es pot calcular el valor de l'àrea de la columna, amb la que es pot obtenir el diàmetre per cada zona, com es presenta a la taula 12.7.5.11.

$$A = \frac{G \left( \frac{\text{lb}}{\text{s}} \right)}{G \left( \frac{\text{lb}}{\text{s} \cdot \text{ft}^2} \right)} \quad \text{Equació 12.7.5.10}$$

**Taula 12.7.5.11.** Paràmetres necessaris per al càlcul del diàmetre de la columna CD-302. Valor del diàmetre trobat per a les dues zones.

	PART SUPERIOR	PART
F	137,000	137,000
$\varphi$	0,763	1,451
$\mu$ (cP)	0,457	0,169
$\rho_G$ (lb/ft <sup>3</sup> )	0,716	0,502
$\rho_L$ (lb/ft <sup>3</sup> )	81,810	43,020
$g_C$ (lb·ft/lb <sub>f</sub> ·s <sup>2</sup> )	32,000	32,000
G (lb/s·ft <sup>2</sup> )	1,074	0,372
G (lb/hr)	2116	2570
A (ft <sup>2</sup> )	0,548	1,916
<b>D (m)</b>	<b>0,250</b>	<b>0,469</b>

Es compara el valor del diàmetre obtingut per les dues zones de manera teòrica i amb el Hysys a la taula 12.7.5.12. Com a valor final, s'agafa el del Hysys ja que és el diàmetre més gran i, per tant, el més conservatiu.

**Taula 12.7.5.12.** Valors del diàmetre de la columna CD-302 obtinguts per les dues zones pel mètode teòric i amb el Hysys.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR	HYSYS
D (m)	<b>0,250</b>	<b>0,469</b>	<b>0,6096</b>

La columna de destil·lació CD-302 s'ha dissenyat a través del programa Hysys, que utilitza dades teòriques que té a la seva base de dades. A l'hora de construir la columna, és aconsellable treballar amb un marge de seguretat, consistent en realitzar un sobredimensionat de la columna, per tal d'obtenir la separació desitjada en cas que el seu comportament fos diferent al teòric. L'eficiència de separació està directament relacionada amb l'alçada de rebliment a la columna, per tant el sobredimensionament ve donat per una augment en l'alçada en el rebliment. Pel cas de les columnes, es decideix sobredimensionar en un 25% sobre l'alçada de rebliment, tal com s'indica a continuació.

$$h \text{ rebliment} = h \text{ rebliment Hysys} \cdot 1,25 = 9,051 \text{ m} \cdot 1,25 = \mathbf{11,314 \text{ m}}$$

S'ha de tenir en compte que al augmentar l'alçada de rebliment, la pèrdua de càrrega serà més gran. El Hysys dona la pèrdua de càrrega en funció de l'alçada, per tant es pot realitzar el càlcul considerant l'alçada sobredimensionada.

$$0,0823 \text{ KPa/m} \cdot 11,314 \text{ m} = \mathbf{0,931 \text{ KPa}}$$

En aquest cas el Hysys no dona el número de peces i el pes del rebliment.

### 12.7.5.3 Disseny mecànic

L'alçada de la columna de destil·lació no només ve donada per l'alçada necessària de rebliment, sinó que s'han de tenir en compte altre factors com l'espai superior i inferior necessari o el suport per al rebliment. A més, es divideix el rebliment en dos zones separades per un redistribuïdor, que permet millorar el funcionament de la torre. La divisió en dos zones també evita la compactació i la formació de camins preferencials.

La divisió es realitza de manera que s'obtenen dues zones dividides per l'aliment, per tant, es calcula l'alçada superior i inferior calculant l'alçada de rebliment corresponent a cada plat i multiplicant-la per la quantitat de plats que hi ha en cada zona. S'obté una alçada superior de 4,849 metres i una alçada inferior de 6,465 metres.

A continuació es detallen els diferents elements que contindrà la columna al seu interior que no s'han tingut en compte en el disseny amb el Hysys, per fer-ho s'utilitza la guia donada per la casa "*Saint-Gobain Norpro*":

- **Distribuïdor de líquid**, s'utilitza el mateix que en la columna d'absorció AB-301, ja que segons la casa "*Saint-Gobain Norpro*" és vàlid per al diàmetre de treball de la columna CD-302. A l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, es troba l'explicació detallada d'aquest distribuïdor.
- **Redistribuïdor de líquid**, s'utilitza el mateix que en la columna d'absorció AB-301, ja que segons la casa "*Saint-Gobain Norpro*" és vàlid per al diàmetre de treball de la columna CD-302. A l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, es troba l'explicació detallada d'aquest redistribuïdor.
- **Reixetes de suport**, s'utilitzen els mateixos que en la columna d'absorció AB-302, ja que segons la casa "*Saint-Gobain Norpro*" són vàlids per al diàmetre de treball de la columna CD-302. A l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, es troba l'explicació detallada de les reixetes de suport.
- **Limitadors de rebliment**, com en el cas de l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, s'ha de comprovar la necessitat de posar limitadors en la columna CD-302, utilitzant la taula presentada de l'apartat 11.4.6.1.3 tal com indica la casa "*Saint-Gobain Norpro*".

La variació de pressió en la columna és de 0,10 in. WC/ft i la densitat del rebliment de 71 lbs/ft<sup>3</sup>, per tant, no és necessari utilitzar limitadors de rebliment en la columna.

- **Boques d'home**, s'utilitzen les mateixes boques d'home pel que fa al model, quantitat i posició que en la columna d'absorció AB-301. A l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, es troba l'explicació detallada de les boques d'home utilitzades.

Cal tenir en compte l'espai necessari que s'ha de deixar en la part inferior de la columna, s'utilitzen els mateixos espais que en el cas de la columna d'absorció AB-301, detallats a l'apartat anterior.

Per tant, es pot calcular l'alçada total del cos de la columna, tal com s'indica a continuació:

$$\begin{aligned}
 h_{cos} &= h_{\text{espai superior}} + h_{\text{distribuidor}} + h_{\text{espai dist-rebl}} + \\
 &h_{\text{rebliment superior}} + h_{\text{suport}} + h_{\text{espai intermedi}} + h_{\text{redistribuidor}} \\
 &+ h_{\text{espai dist-rebl}} + h_{\text{rebliment inferior}} + h_{\text{suport}} + h_{\text{espai inferior}} = \\
 &= 1000 \text{ mm} + 450 \text{ mm} + 750 \text{ mm} + 4849 \text{ mm} + 114 \text{ mm} + 1000 \text{ mm} + \\
 &+ 450 \text{ mm} + 750 \text{ mm} + 6465 \text{ mm} + 114 \text{ mm} + 2000 \text{ mm} = 17942 \text{ mm}
 \end{aligned}$$

Per tal d'abaratir costos es decideix fer la columna de 18 metres, ja que serà més fàcil i econòmic trobar un proveïdor que vengui la xapa d'aquesta longitud i no de 17,942 m. La longitud que falta s'afegeix a la dels espais buits superior per sobre del distribuïdor, intermedi per sobre del distribuïdor i inferior sota del limitador, ja que això no afectarà al funcionament de la columna. S'obté un espai de 1019 mm pel superior i intermedi i 2020 mm per l'inferior.

A continuació es dissenya la columna de destil·lació CD-302 mitjançant el codi ASME, es realitza el càlcul per a la carcassa cilíndrica i per als fons torisfèrics.

### **Pressió de disseny**

La pressió de disseny per a la es calcula aplicant la norma següent:

$$Pressió \text{ de disseny} = \max(1,1 \cdot P. \text{operació}, P. \text{operació} + 2atm)$$

$$Pressió \text{ de disseny} = \max(3,3 \text{ atm}, 5 \text{ atm}) = 5atm$$

Per tant, sabent que la pressió d'operació són 3 atmosferes (disseny funcional amb el Hysys) es pot calcular la pressió de disseny.

Pressió operació = 3 atm.

Pressió de disseny = **5 atm.**

### **Temperatura de disseny**

En aquest cas, la temperatura de disseny be donada pel disseny funcional (Hysys). A continuació es presenten les temperatures d'operació per caps i cues de la columna:

Temperatura d'operació caps = 11,82 °C

Temperatura d'operació cues = 148,40°C

La temperatura de disseny be donada:

$$Temperatura\ de\ disseny = \max(80^{\circ}C, T.\ operació, +15^{\circ}C)$$

Temperatura de disseny caps = 80 °C

Temperatura de disseny cues = 163,4 °C

**Material**

Per decidir quin és el millor material per la columna CD-302 cal tenir en compte que es treballa amb HCl i la corrosió que aquest compost produeix és elevada, consultant la taula de la figura 12.7.5.22 s'escull **HASTELLOY® alloy B-2** amb una corrosió menor de 0,508mm/any.

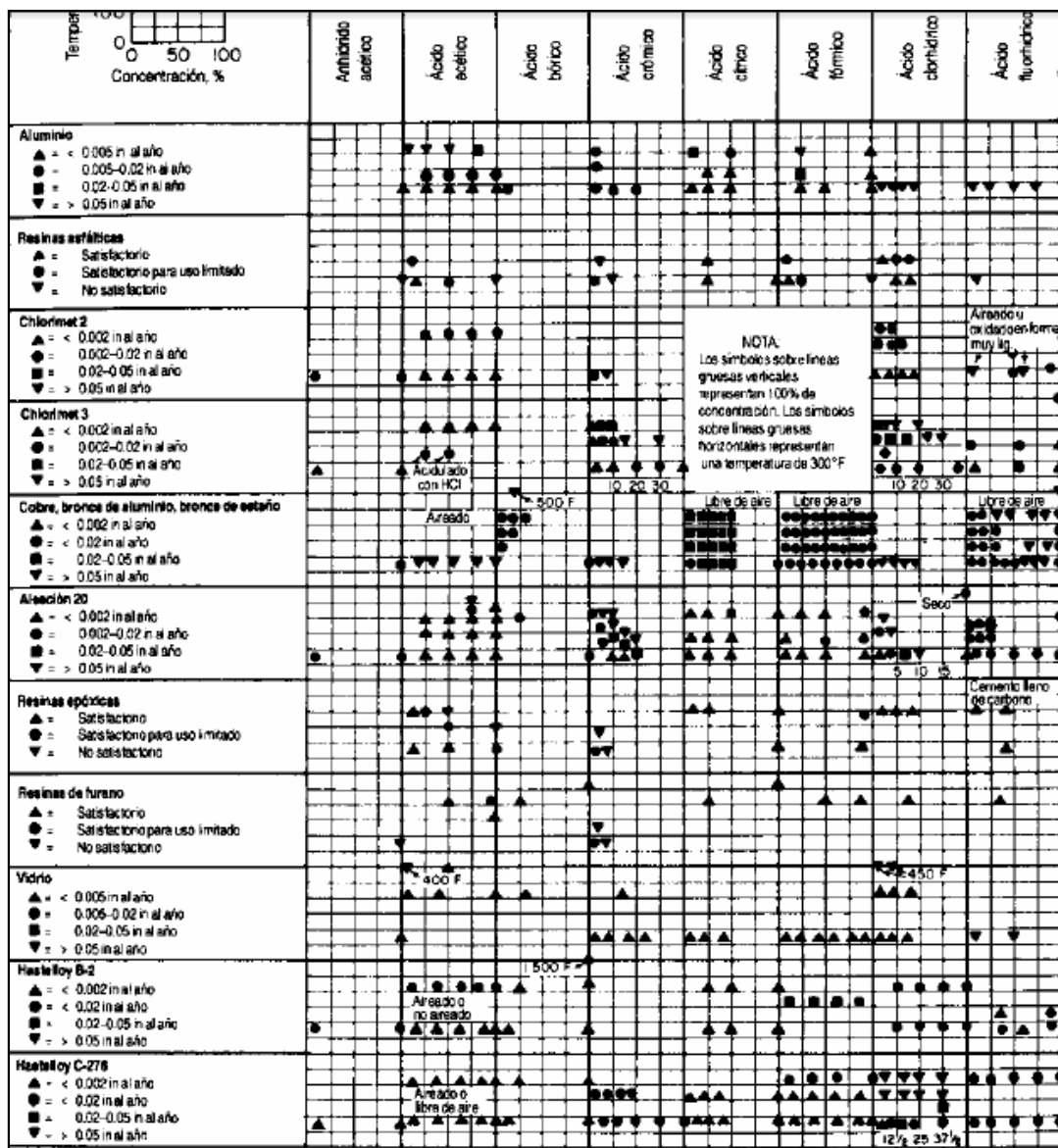


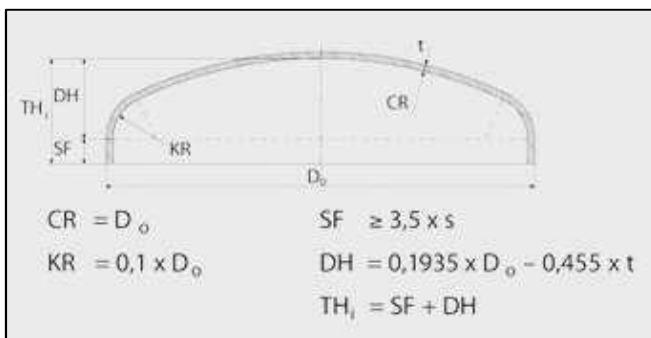
Figura 12.7.5.22 Dades detallades de corrosió en materials de construcció [Perry's Handbook]

### Espessor dels fondos i el capçal. Càlcul a pressió interna

Els tipus de fondos i capçals més utilitzats són el toriesfèric, l'hemisfèric i l'el·lipsoïdal, la seva elecció depèn de les condicions d'operació i el cost econòmic, en aquest cas s'utilitza el toriesfèric.

S'hauria de realitzar el càlcul del fondo i el capçal de manera independent, ja que treballen a temperatures de disseny diferents. Com que la única diferencia ve donada per la tensió admissible del material que varia amb la temperatura, es decideix dissenyar per la temperatura més desfavorable, que s'obté en les cues de la columna (temperatura més alta). Per tant, només fa falta realitzar el disseny d'un fondo, que serà exactament igual a l'altre.

Aquest fons ve definit pel radi de la corona (L) i el radi del colze (r) que es calculen respecte al diàmetre del cos donat pel Hysys, tal com indica la casa "Koenig-co" en la figura 12.7.5.23, extreta de la seva pàgina web.



**Figura 12.7.5.23.** Esquema del fons toriesfèric per tal de determinar l'alçada del fons de la columna de destil·lació CD-302.  $s=t$ .

Per tant,

$$L = D = 609,6 \text{ mm} = 609,6 \text{ mm}$$

$$r = 0,1 \cdot D = 0,1 \cdot 609,6 \text{ mm} = 60,96 \text{ mm}$$

$$\frac{L}{r} = 10$$

Per una relació  $L/r$  menor de  $16^{2/3}$  l'espessor es calcula amb l'equació 12.7.5.11.

$$t = \frac{P \cdot L \cdot M}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad \text{Equació 12.7.5.11}$$



on:

t = espessor del fondo (mm)

P = pressió de disseny del recipient (bar) = 5

M = factor que depèn de la relació L/r, en aquest cas igual a 1,54

E = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)

S = càrrega admissible del material (bar) = 7583,4 bar

L= radi de la corona (mm) = 609,6

El sobre espessor per corrosió del material és de 0,508mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobreespessor serà 7,62 mm.

C<sub>1</sub> = marge per corrosió (mm) = 7,62 mm

C<sub>2</sub> = tolerància de fabricació (mm) = 10% de l'espessor

El resultat és de 8,78 mm, però donat que els espessors estàndards de xapa a Europa són: 3, 4, 5, 6, 8, 10, 12, 15, 20..., s'agafa un espessor dels fondos de 10 mm.

***espessor del fondo i el capçal = 10mm***

### **Espessor del cos de la columna. Càlcul a pressió interna**

L'equació 12.7.5.12 permet trobar l'espessor del cos de la columna.

$$t_1 = \frac{P \cdot R_{int}}{S \cdot E - 0,6 \cdot P} + C \cdot A \quad \text{Equació 12.7.5.12}$$

on:

t<sub>1</sub> = espessor del cos (mm)

P = pressió de disseny del recipient (bar) = 5

R<sub>int</sub> = radi intern de la columna (mm) = 304,8

E = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)

S = càrrega admissible del material (bar) = 7583,4 bar

C.A = sobreespessor (mm)

La tolerància de fabricació pel cas d'un cilindre és nul·la i el sobre espessor per corrosió del material és de 0,508mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobreesspessor serà 7,62 mm.

El resultat és de 7,857 mm, però donat que els espessors estàndards de xapa a Europa són: 3, 4, 5, 6, 8, 10, 12, 15, 20..., s'agafa un espessor del cos de 8 mm.

$$\text{espessor dels cos de la columna} = 8 \text{ mm}$$

### Alçada dels fondo i el capçal

Una vegada determinats els espessors del cos i els fondo i capçal es pot determinar l'alçada del fondo i el capçal per determinar l'alçada total de l'equip, tal com indica la casa "Koenig-co" en la figura 12.7.5.23 extreta de la seva pàgina web.

$$DH = 0,1935 \cdot D_o - 0,455 \cdot t \quad \text{Equació 12.7.5.13}$$

$$SF = 3,5 \cdot s \quad \text{Equació 12.7.5.14}$$

$$TH = SF + DH \quad \text{Equació 12.7.5.15}$$

Es calcula l'alçada del fons torisfèric sense tenir en compte l'espessor de la xapa, tal com s'indica a continuació:

$$DH = 0,1935 \cdot 609,6 \text{ mm} - 0,455 \cdot 10 \text{ mm} = 113,41 \text{ mm}$$

$$SF = 3,5 \cdot 10 \text{ mm} = 35 \text{ mm}$$

$$TH = 35 \text{ mm} + 113,41 \text{ mm} = 148,41 \text{ mm}$$

Per tant, l'alçada de la columna sense l'espessor és de **18297 mm**.

### 12.7.5.4 Pes de la columna

#### Pes de la columna buida

Es calcula el volum del fondo i el capçal de la columna mitjançant l'equació 12.7.5.16

$$Vi = 0,1 \cdot (D_{col})^3 \quad \text{Equació 12.7.5.16}$$

Per tant,

$$Vi = 0,1 \cdot (609,6 \text{ mm})^3 = 0,0227 \text{ m}^3$$

Com que es tenen un fondo i un capçal el volum és de 0,0454 m<sup>3</sup>.

Per calcular el pes dels capçals, es calcula el volum extern del fondo i el capçal, mitjançant l'equació 12.7.5.17.

$$V_e = 0,1 \cdot ((D_{col} + 2 \cdot t)^3) \text{ Equació 12.7.5.17}$$

Per tant,

$$V_e = 0,1 \cdot (609,6 \text{ mm} + 2 \cdot 10 \text{ mm})^3 = 0,0250 \text{ m}^3$$

Com que es tenen dos capçals el volum és de  $0,0500 \text{ m}^3$ .

Per tant, la resta correspon al volum de la paret dels capçals:

$$V_{paret} = 0,0500 \text{ m}^3 - 0,0454 \text{ m}^3 = 0,0046 \text{ m}^3$$

Es calcula el volum intern i extern del cos de la columna, per tal de determinar el volum de paret.

$$V_i = \pi \cdot \left(\frac{D_{col}}{2}\right)^2 \cdot h = \pi \cdot \left(\frac{609,6 \text{ mm}}{2}\right)^2 \cdot 18000 \text{ mm} = 5,254 \text{ m}^3$$

$$V_e = \pi \cdot \left(\frac{D_{col} + 2 \cdot t}{2}\right)^2 \cdot h = \pi \cdot \left(\frac{609,6 \text{ mm} + 2 \cdot 8 \text{ mm}}{2}\right)^2 \cdot 18000 \text{ mm}$$

$$= 5,533 \text{ m}^3$$

$$V_{paret} = 5,533 \text{ m}^3 - 5,254 \text{ m}^3 = 0,279 \text{ m}^3$$

Per tant, el volum total de la paret de la columna és de  $0,2836 \text{ m}^3$ .

Sabent que la densitat del Hastelloy B2 és de  $9220 \text{ Kg/m}^3$ , es pot calcular el pes de la columna buida, tal com s'indica a continuació:

$$0,2836 \text{ m}^3 \cdot \frac{9220 \text{ Kg}}{1 \text{ m}^3} = 2615 \text{ Kg}$$

Es considera que el pes dels elements interns és del 10 % del total del pes de l'equip buit, tal com s'indica a continuació.

$$Pes \text{ elements interns} = 0,1 \cdot 2615 \text{ Kg} = 261,5 \text{ Kg}$$

El pes del rebliment ve donat pel Hysys i és de  $3756 \text{ Kg}$ , per tant es calcula el pes total de la columna buida:

$$Pes \text{ buit} = 2615 \text{ Kg} + 261,5 \text{ Kg} + 3756 \text{ Kg} = \mathbf{6633 \text{ Kg}}$$

### Pes de la columna plena d'aigua

Es calcula el volum de la columna sumant el volums dels capçals i el cos:

$$V_{col} = 0,0454 \text{ m}^3 + 5,254 \text{ m}^3 = 5,2994 \text{ m}^3$$

Per tant, amb la densitat de l'aigua a la temperatura de 25°C i el pes de la columna buida es pot calcular el pes de la columna amb aigua:

$$Pes_{col\ aigua} = 6633\ Kg + 5,2994\ m^3 \cdot \frac{997,13\ Kg}{1\ m^3} = 11917\ Kg$$

### Pes de la columna en operació

A partir de la densitat mitjana del fluid d'operació es calcula el pes de la columna en operació:

$$Pes_{col\ operació} = 6633\ Kg + 5,2994\ m^3 \cdot \frac{504,9\ Kg}{1\ m^3} = 9309\ Kg$$

#### 12.7.5.5 Aïllament

Degut a que la temperatura d'operació de l'equip és superior a 60°C cal aïllar l'equip amb llana de vidre. A més, al capçal es tenen temperatures molt baixes, per tant també s'ha d'aïllar. Es realitza el càlcul pel capçal i pel fondo de manera independent amb l'equació 12.7.5.18. Es considera una temperatura ambient de 15°C.

$$X = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{\Delta T}{D_{ext}}\right)^4} \quad \text{Equació 12.7.5.18}$$

on:

X = espessor de l'aïllant (cm)

$\Delta T$  = diferència de temperatura entre l'interior i l'exterior del recipient

$D_{ext}$  = diàmetre exterior del recipient (m)

**Taula 12.7.5.13** Resultats obtinguts pel disseny a la part superior i inferior.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR
T disseny (°C)	80,0	163,4
$\Delta T$ (°C)	65,0	148,4
X (cm)	2,61	2,13

S'utilitza en els dos cassos el més desfavorable i es decideix augmentar el valor obtingut pel doble per assegurar un bon aïllament.

$$X = 2,61\ cm \times 2 = 5,22\ cm$$

Pel que fa al cos de la columna, s'aïllarà amb el més desfavorable, és a dir, 5,22 cm.

Aquest aïllant quedarà recobert per una capa d'alumini per tal de protegir-lo de les inclemències meteorològiques.

Es calcula el volum de l'aïllant calculant el volum als fondos i al cos, els resultats es presenten a la taula 12.7.5.14.

**Taula 12.7.5.14.** Càlcul del volum d'aïllant necessari en la columna CD-302

Volum aïllant capçal (m <sup>3</sup> )	0,015
Volum aïllant fondo (m <sup>3</sup> )	0,015
Volum aïllant cos (m <sup>3</sup> )	2,001
<b>Volum aïllant total (m<sup>3</sup>)</b>	<b>2,031</b>

## 12.7.6 Columna de destil·lació CD-401

### 12.7.6.1 Disseny funcional

Es dissenya aquesta torre de destil·lació amb la finalitat de refinar el corrent líquid que s'obté del condensador C-401, és important que el destil·lat que s'obtingui d'aquesta torre sigui de molt elevada puresa en MIC ja que l'existència d'impureses pot donar lloc a reaccions secundaries no desitjades.

#### Disseny teòric

Es realitza el disseny teòric de la columna mitjançant el mètode de "Shorcut " teòric, que utilitza "Fenske", "Underwood" i la correlació de "Gilliand" per trobat el número d'etapes i l'etapa de l'aliment.

La columna CD-401 és diferent de la resta degut a que es dona la reacció química inversa a la piròlisi als caps; és a dir, el MIC reacciona amb el HCl per tornar a formar MCC, que surt per cues degut al seu punt d'ebullició. Per tant, com que tant els mètodes teòrics com el Hysys no té en compte aquesta reacció química, es modifica l'entrada de la columna considerant que:

- Els Kmols/h d'HCl que entren són menors que els de MIC, per tant l'HCl és el reactiu limitant.
- No entra HCl a la columna, ja que reacciona completament amb el MIC per donar MCC.
- Al cabal molar de MCC se li sumen els Kmols/h d'HCl, ja que reaccionen amb el MIC per donar MCC.
- Al cabal molar de MIC se li resten els Kmols/h d'HCl, ja que reaccionen amb l'HCl per donar MCC.

Una vegada modificada l'entrada es passa a fer el disseny tant teòric com amb el Hysys.

Primerament, són necessàries les volatilitats relatives dels diferents compostos respecte el component clau pesat, és a dir, el MCC. La volatilitat relativa d'un compost ve definida per l'equació 12.7.6.1. Com que la volatilitat depèn de la temperatura, s'utilitzarà una volatilitat relativa mitjana a la temperatura de l'aliment.

$$\alpha_{i,j} = \frac{k_i}{k_j} \quad \text{Equació 12.7.6.1}$$

on,

$\alpha_{i,j}$ : volatilitat relativa del component i respecte del component j

$k_i$ : constant d'equilibri del component i

$k_j$ : constant d'equilibri del component j (component de referència – heavy key)

S'extreuen les constants d'equilibri de cada compost amb el Hysys, com que a la temperatura de l'aliment la mescla és líquida el Hysys no dona cap valor de k, per tant, s'agafa la temperatura mitjana entre caps i cues i s'agafen aquests valors de constant d'equilibri. Encara que la constant d'equilibri varia fortament amb la temperatura, la volatilitat relativa depèn menys d'aquesta, ja que és el quocient de dos constants que varien en el mateix sentit.

**Taula 12.7.6.1** Constants d'equilibri per cada compost a la temperatura d'entrada de l'aliment.

Compost	k
MCC	0,5563
MIC	2,9880
Toluè	0,3133

Per tant, a partir d'aquestes es poden calcular les volatilitats relatives de cada compost respecte el MCC, els resultats es presenten a la taula 12.7.6.2

**Taula 12.7.6.2.** Volatilitats relatives respecte el MCC a la temperatura d'entrada a la columna CD-401.

Compost	$\alpha_{i,MCC}$
MCC	1,000
MIC	5,3712
Toluè	0,5632

Es fixa la fracció recuperada dels compostos claus que es vol obtenir en el destil·lat i en el residu, tal com s'indica a continuació.

$$FR_{MCC,B}=0,9999$$

$$FR_{MIC,D}=0,9999$$

Mitjançant l'equació de Fenske, presentada a continuació, es calcula el número mínim d'etapes necessàries per a la separació desitjada.

$$N_{min} = \frac{\ln\left(\frac{FR_{LK,D} \cdot FR_{HK,B}}{(1-FR_{LK,D}) \cdot (1-FR_{HK,B})}\right)}{\ln(\alpha_{LK-HK})} \quad \text{Equació 12.7.6.2}$$

on,

$FR_{LK,D}$ : fracció recuperada del clau lleuger en el destil·lat

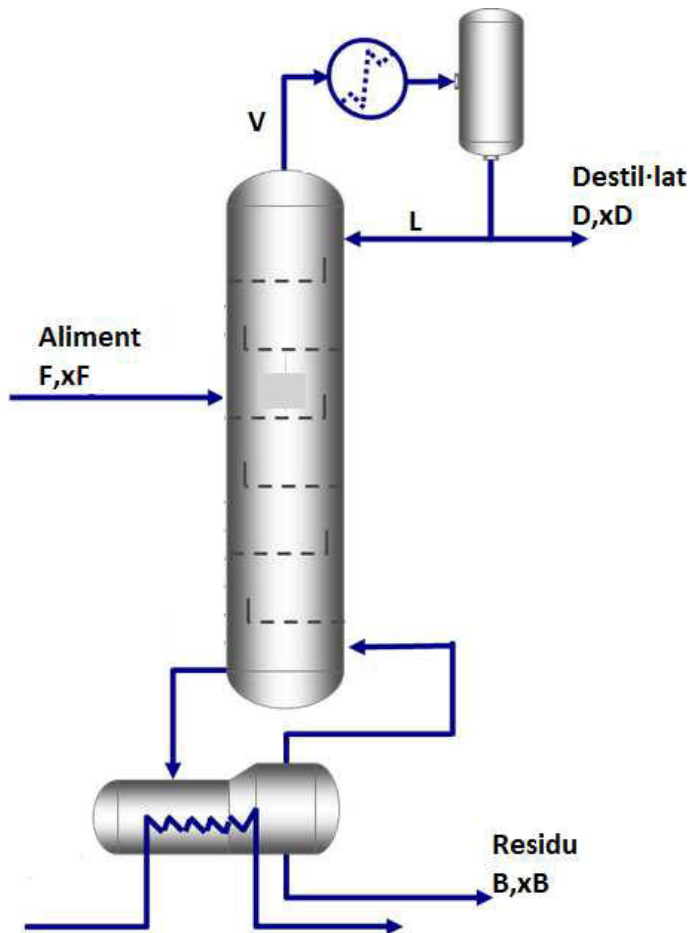
$FR_{HK,B}$ : fracció recuperada del clau pesat en el refinat

$(\alpha_{LK-HK})$ : volatilitat relativa del component clau lleuger respecte del component clau pesat.

Per tant,

$$N_{min} = \frac{\ln\left(\frac{0,9999 \cdot 0,9999}{(1 - 0,9999) \cdot (1 - 0,9999)}\right)}{\ln(5,3712)} = 10,958 \approx 11 \text{ etapes d'equilibri}$$

En aquest moment es fa necessari realitzar un balanç de matèria a la columna, mitjançant la figura 12.7.6.1.



*Figura 12.7.6.1. Esquema general de la columna de destil·lació CD-401.*

El balanç de matèria es presenta a continuació:

- Balanç de matèria global  
 $F=B+D$   
 $V=L+D$
- Balanç de matèria pel component i  
 $F \cdot x_{F,i} = B \cdot x_{B,i} + D \cdot x_{D,i}$

S'ordenen els components per la seva volatilitat (de  $k$  més alta a més baixa) en la taula 12.7.6.3 i es resol el balanç de matèria considerant que els no claus lleugers surten totalment per caps i els no claus pesats surten totalment per baix. Es presenta el balanç de matèria, es té en compte que l'entrada no és la mateixa que la del balanç de matèria ja que aquesta s'ha modificat per tenir en compte la reacció química.



**Taula 12.7.6.3.** Balanç de matèria a la columna CD-401 una vegada imposades les fraccions recuperades dels components claus. No es considera la reacció química.

	Compost	k	z <sub>i,F</sub>	F·z <sub>i,F</sub>	x <sub>i,D</sub>	D·x <sub>i,D</sub>	x <sub>i,B</sub>	B·x <sub>i,B</sub>
LK	MIC	0,55630	0,35538	6,59700	0,99998	6,59634	0,00006	0,0007
HK	MCC	2,98800	0,07687	1,42700	0,00002	0,00014	0,11924	1,4269
HNK	Toluè	0,31330	0,56774	10,53900	0,00000	0,00000	0,88071	10,5390
			<b>F</b> <b>(kmols/h)</b>	18,5630	<b>D (kmols/h)</b>	6,5965	<b>B</b> <b>(kmols/h)</b>	11,9665

Una vegada resolt el balanç de matèria, es calcula el (L/D)<sub>min</sub> mitjançant el mètode de Underwood, tal com s'indica a continuació:

$$(\Delta V)_F = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i \cdot F \cdot z_{i,F}}{\alpha_i - \emptyset} \quad \text{Equació 12.7.6.3}$$

On s'imposa  $(\Delta V)_F=0$  i es troba el valor de  $\emptyset$ , resolent l'equació 12.7.6.3.

El valor de  $\emptyset$  trobat és de 1,502; a partir d'aquest valor es calcula el valor de V<sub>min</sub> mitjançant l'equació 12.7.6.4.

$$(V)_{\min} = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i \cdot D \cdot x_{i,D}}{\alpha_i - \emptyset} \quad \text{Equació 12.7.6.4}$$

Troba un valor de V<sub>min</sub>=9,158 Kmols/h.

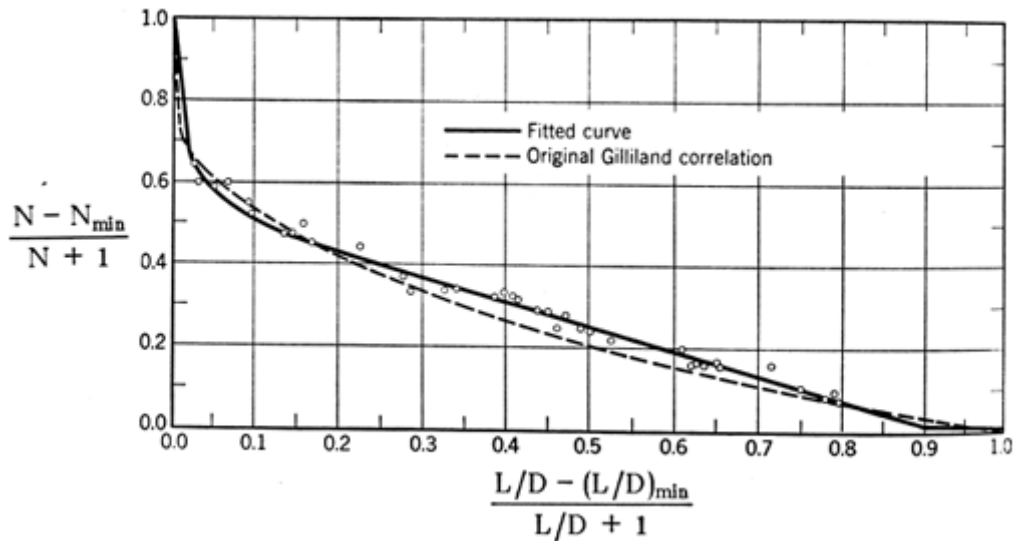
A partir del valor de V<sub>min</sub> es calcula (L/D)<sub>min</sub>, tal com s'indica en l'equació 12.7.6.5.

$$\left(\frac{L}{D}\right)_{\min} = \frac{(V)_{\min}}{D} - 1 \quad \text{Equació 12.7.6.5}$$

Troba un valor de  $\left(\frac{L}{D}\right)_{\min} = 0,3883$

Considerant que  $\left(\frac{L}{D}\right) = 1,2 \cdot \left(\frac{L}{D}\right)_{\min} = 0,466$

Sabent el valor de  $\left(\frac{L}{D}\right)_{\min}$  i  $\left(\frac{L}{D}\right)$  es passa a utilitzar la correlació de Gilliland, presentada a la figura 12.7.6.2, que permet obtenir el número d'etapes d'equilibri necessàries a la columna.



**Figura 12.7.6.2.** Gràfic de la correlació de Gilliland per al càlcul del número d'etapes necessàries en la columna CD-401.

S

abent,

$$\frac{\frac{L}{D} - \left(\frac{L}{D}\right)_{\min}}{\frac{L}{D} + 1} = \frac{0,466 - 0,388}{0,466 + 1} = 0,0532$$

Es troba el valor de les ordenades utilitzant "Original Gilliland correlation":

$$\frac{N - (N)_{\min}}{N + 1} = 0,62$$

Per tant, es troba un valor de **N de 31 etapes**.

Per trobar l'etapa de l'aliment mínima s'utilitza l'equació 12.7.6.6.

$$N_{F,\min} = \frac{\ln\left(\frac{\left(\frac{x_{LK}}{x_{HK}}\right)_D}{\frac{z_{LK}}{z_{HK}}}\right)}{\ln(\alpha_{LK-HK})} \quad \text{Equació 12.7.6.6}$$

on,

$z_{LK}$ : fracció molar del component clau lleuger a l'aliment

$z_{HK}$ : fracció molar del component clau pesat a l'aliment

Es resol l'equació 12.7.6.7:

$$N_{F,\min} = \frac{\ln\left(\frac{\left(\frac{0,99998}{0,00002}\right)}{\frac{0,35538}{0,07687}}\right)}{\ln(5,3712)} = 5,53 \approx \text{Etapa 6} \quad \text{Equació 12.7.6.7}$$

Per trobar l'etapa de l'aliment s'utilitza l'equació 12.7.6.8, presentada a continuació.

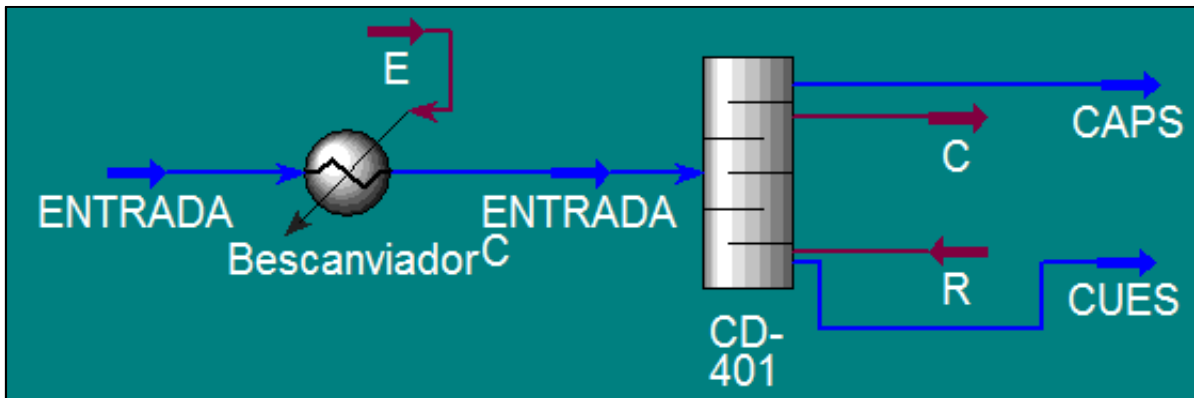
$$\frac{N_{F,min}}{N_{min}} = \frac{N_F}{N} \quad \text{Equació 12.7.6.8}$$

Per tant,

$$N_F = \frac{N_{F,min}}{N_{min}} \cdot N = \frac{6}{11} \cdot 31 = 16,9091 \approx \text{Etapa 17}$$

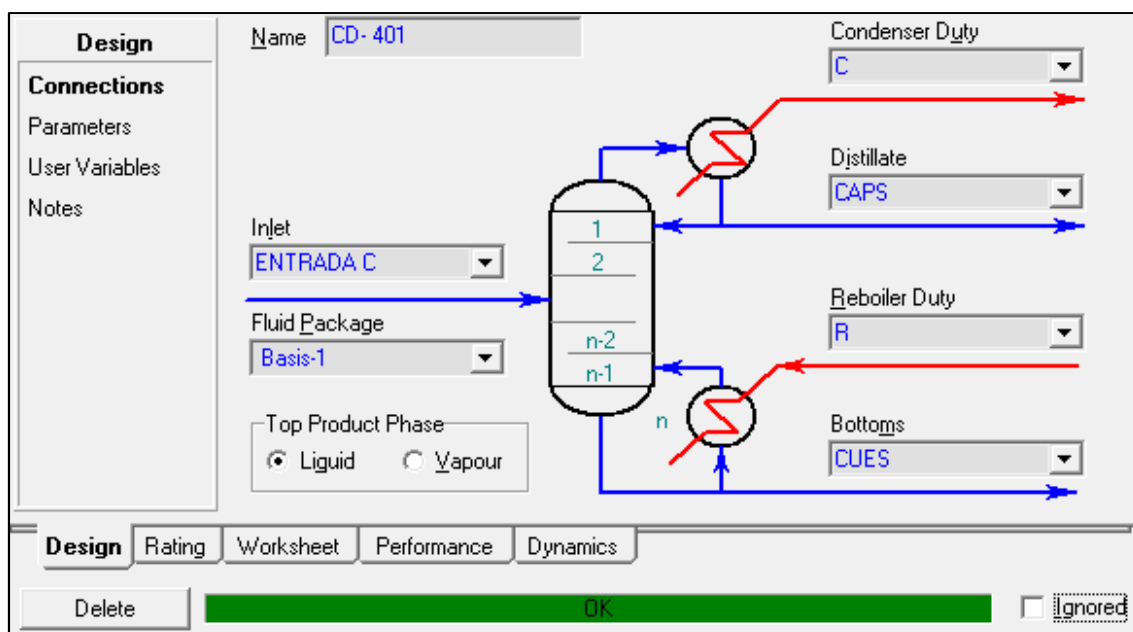
### Disseny amb AspenTech "Hysys v 7.3"

Es dissenya la columna de destil·lació CD-401 pel mètode "Shortcut Column" sense tenir en compte la reacció química, s'imposa una fracció molar del component clau pesat per caps i del component clau lleuger per cues molt baixa (0,0001), ja que es vol separar la màxima quantitat de MIC. A la figura 12.7.6.3 es presenta l'esquema general utilitzat en el Hysys per realitzar el disseny de la columna de destil·lació CD-401, s'inclou també el bescanviador que escalfa la mescla que surt del condensador C-401 abans d'entrar a la columna.



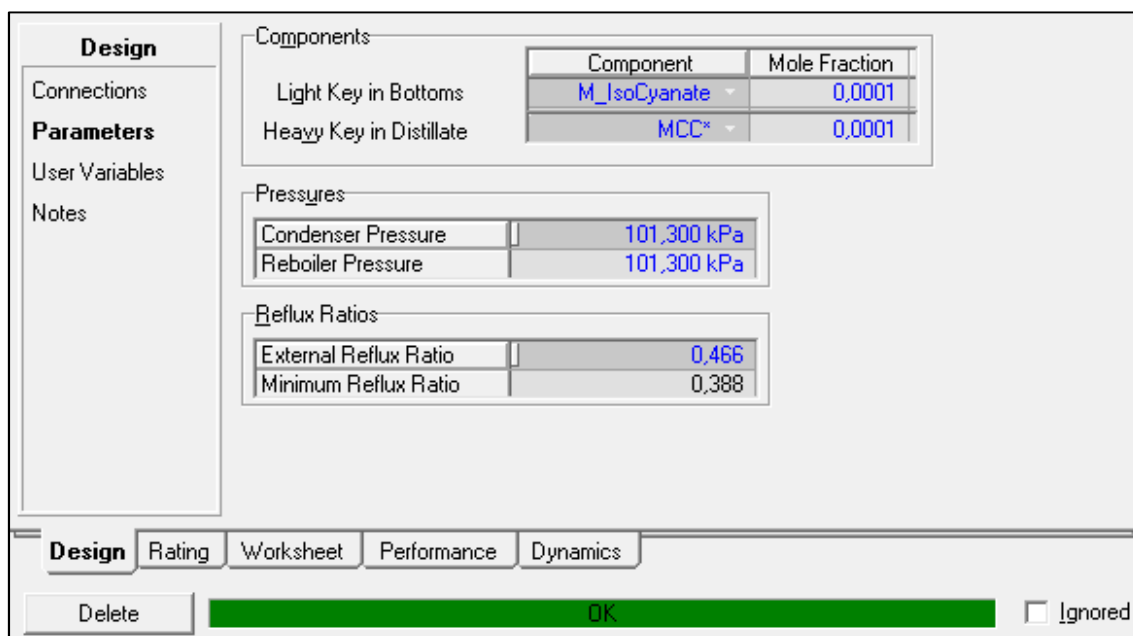
**Figura 12.7.6.3** Esquema general utilitzat en el Hysys pel disseny de la columna CD-401 pel mètode de "Shortcut Column"

A la figura 12.7.6.4 es presenta la pantalla principal utilitzada en el Hysys pel disseny de la columna CD-401 pel mètode de "Shortcut Column".



**Figura 12.7.6.4.** Pàgina principal del disseny de la columna de destil·lació CD-401 pel mètode de "Shortcut Column".

A la figura 12.7.6.5 es presenten les condicions imposades en el Hysys per obtenir la separació desitjada. S'imposa un valor de relació de reflux 1,2 vegades més gran que la mínima.



**Figura 12.7.6.6** Condicions imposades per al disseny del "Shortcut Column" en la columna CD-401.

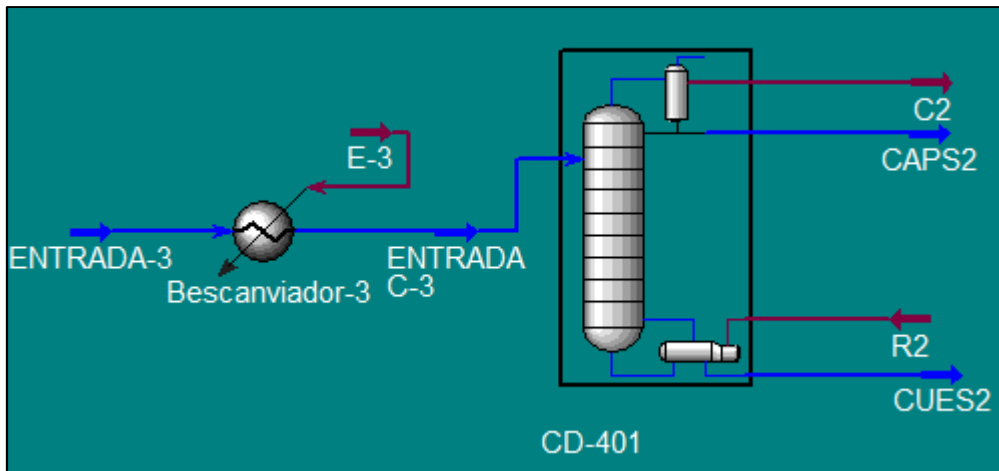
Una vegada imposades les condicions, s'obté el disseny de la columna amb el mètode de "Shorcut Column" amb els paràmetres presentats a la taula 12.7.6.4.

**Taula 12.7.6.4** Paràmetres de disseny obtinguts amb el mètode de "Shorcut column" per a la columna de destil·lació CD-401.

Plats	
Número mínim de plats	9,788
Número de plats	26,29
Plat de l'aliment	11,882
Temperatures	
Condensador (°C)	38,79
Reboiler (°C)	108,10
Cabals	
Rectificació vapor (Kmols/h)	9,670
Rectificació líquid (kmols/h)	3,074
Stripping vapor (kmols/h)	9,670
Stripping líquid (kmols/h)	21,637
Calor condensador (KJ/h)	-264669,683
Calor reboiler (KJ/h)	406461,485

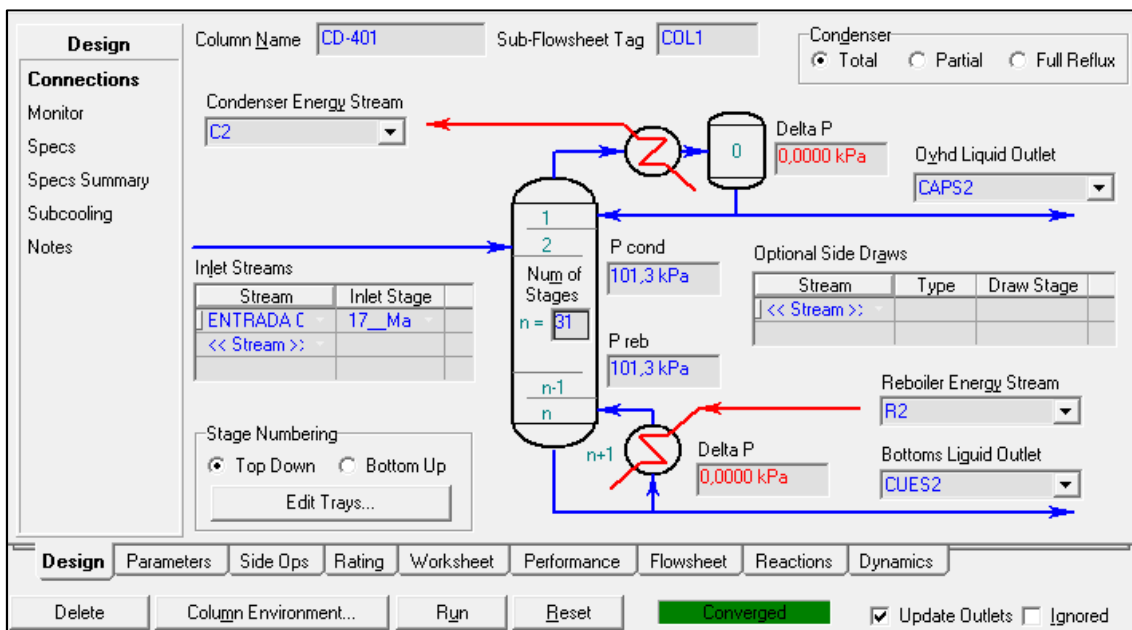
Un cop feta l'aproximació amb el mètode "ShortCut Column" es realitza el mètode rigorós "Distillation Column". Amb els paràmetres donats pel mètode aproximat el Hysys no és capaç de resoldre la columna i es fa necessari canviar alguns dels paràmetres del disseny, com són la relació de reflux i el número de plats. Per arribar a la separació desitjada es decideix augmentar la relació de reflux fins a 1. Encara que amb 26 etapes ja s'obté la separació desitjada s'imposen 31 per assegurar el funcionament de la columna ja que és el valor trobat pel mètode teòric i aquest és més restrictiu. Com a etapa de l'aliment s'escull el valor de 17 trobat teòricament.

A la figures següents es presenta l'esquema general utilitzat en el Hysys per realitzar el disseny de la columna de destil·lació CD-401, s'inclou també el bescanviador que refreda mescla abans de l'entrada a la columna.



**Figura 12.7.6.7** Esquema general utilitzat en el Hysys pel disseny de la columna CD-401 pel mètode de "Distillation Column"

A la figura 12.7.6.8 es presenta la pantalla principal del disseny realitzat amb el Hysys amb el mètode "Distillation Column".



**Figura 12.7.6.8.** Pàgina principal del disseny de la columna de destil·lació CD-401.

Si el disseny de la columna és correcte i el Hysys ha trobat una solució, s'observa una icona en verd on diu "Converged". A les taules 12.7.6.5 i 12.7.6.6 es presenten les condicions de treball i les composicions dels corrents respectivament, per tant, el balanç de matèria adaptat a la reacció química a la columna CD-401.

**Taula 12.7.6.5** *Condicions de treball a la columna de destil·lació CD-401. Balanç de matèria.*

Corrent	Entrada	Sortida caps	Sortida cues
Fracció vapor	0,00	0,00	0,00
Temperatura (°C)	40,00	38,79	108,10
Pressió (Kpa)	101,30	101,30	101,30
Cabal molar (Kmol/h)	18,56	6,60	11,97
Cabal màssic (Kg/h)	1481,00	376,40	1105,00
Cabal de líquid (m <sup>3</sup> /h)	1,70	0,39	1,30
Entalpia molar (KJ/Kmol)	-38560,00	-89240,00	1226,00
Entropia molar	-25,59	67,78	-31,76
Flux de calor (KJ/h)	-715900,00	-588700,00	14670,00

**Taula 12.7.6.5** *Composicions dels cabals a la columna de destil·lació CD-401.*

Corrent	Entrada	Sortida caps	Sortida cues
MCC	0,0769	0,0000	0,1193
HCl	0,0000	0,0000	0,0000
MIC	0,3554	1,0000	0,0000
Toluè	0,5677	0,0000	0,8807
Fosgè	0,0000	0,0000	0,0000
1-naftol	0,0000	0,0000	0,0000
Carbaril	0,0000	0,0000	0,0000

S'obté una columna de 31 etapes d'equilibri, amb l'etapa de l'aliment a la 17. La relació de reflux s'ha hagut d'augmentar fins a 1 per obtenir la separació desitjada.

Com s'observa amb una columna d'aquestes característiques s'aconsegueix la separació total de MIC, obtenint d'aquesta manera un destil·lat amb tot el MIC que entra, i un residu amb la totalitat del cabal molar de MCC i toluè. La calor que donarà la reacció (exotèrmica) es considera menyspreable a la columna.

Una vegada dissenyada la columna, el programa Hysys permet obtenir diferents gràfics, com temperatura, caudal i composició en funció del plat d'equilibri. Aquests es presenten a les figures següents.

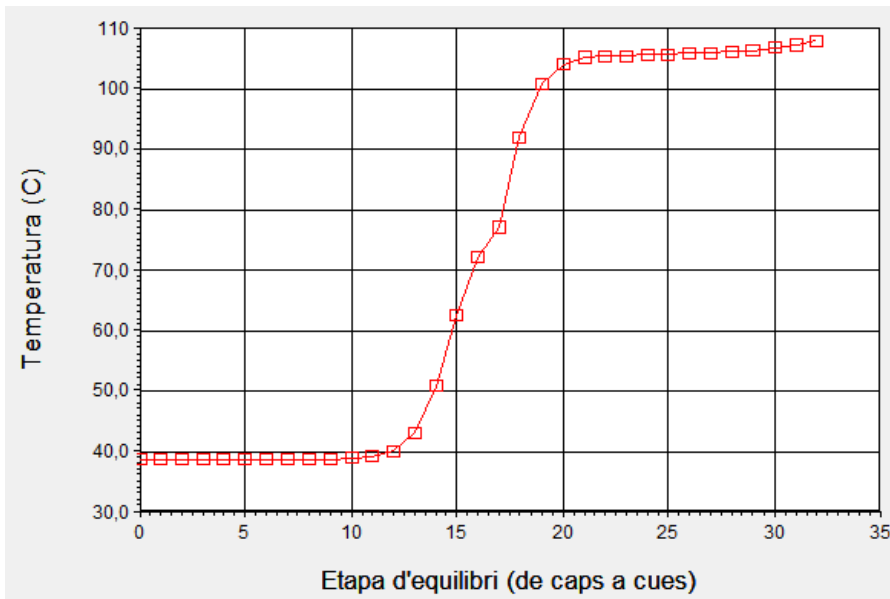


Figura 12.7.6.9 Temperatura en funció del número d'etapa d'equilibri a la columna de destil·lació CD-401.

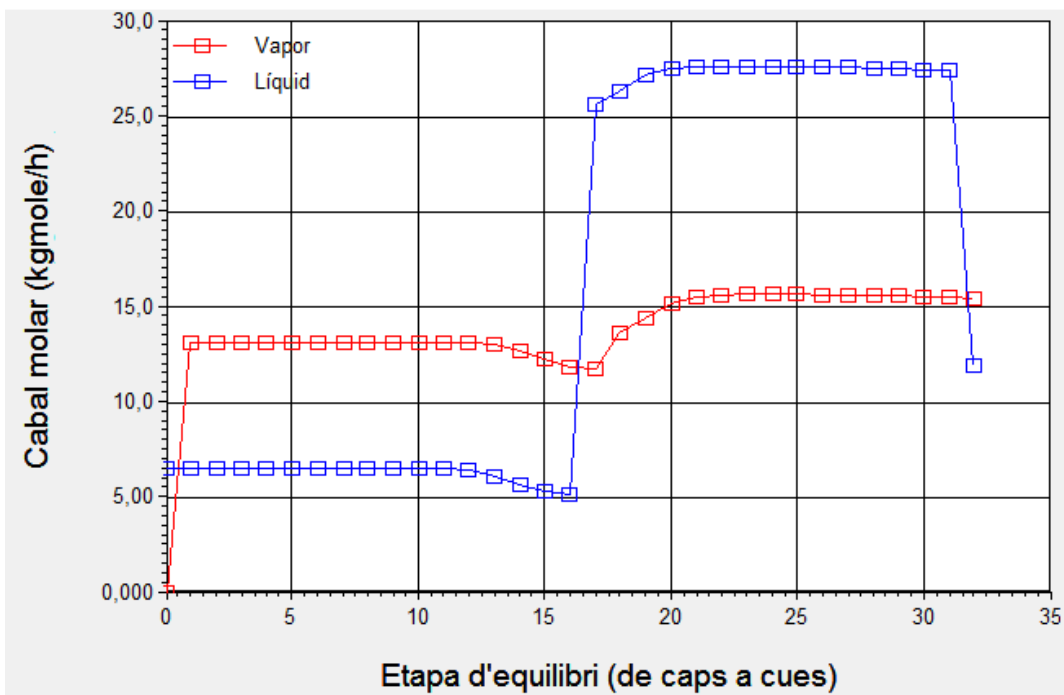
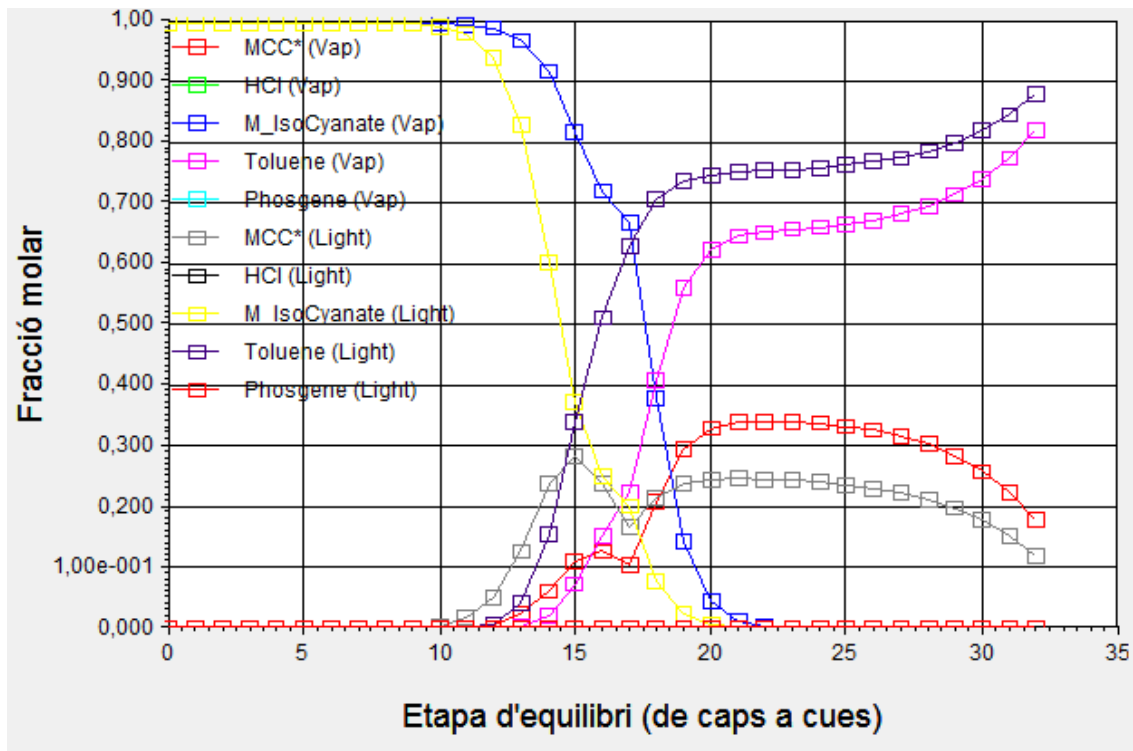


Figura 12.7.6.10 Cabal molar del vapor i del líquid en funció del número d'etapa d'equilibri a la columna de destil·lació CD-401.





**Figura 12.7.6.11** Composició dels diferents components en funció del número d'etapa d'equilibri a la columna de destil·lació CD-401.

Per tant, s'ha utilitzat el disseny definitiu amb el Hysys encara que utilitzant el valor de les etapes d'equilibri i etapa de l'aliment teòriques trobades, ja que eren més conservatives que el disseny amb el Hysys.

### 12.7.6.2 Dimensionat de la columna

Una vegada realitzats tots els càlculs es realitza el dimensionat de la columna. Per defecte, el mètode rigorós treballa amb un diàmetre de 1,5 metres. Com a espai entre plats ha calculat 0,55 metres, un número lògic en les columnes de rectificació. Per realitzar un dimensionat més acurat, el Hysys conté una aplicació anomenada "Tray Sizing".

Aquesta aplicació permet calcular el diàmetre i alçada de la columna tant si es fa de plats com si es fa de rebliment. En aquest cas, és preferible utilitzar la columna de rebliment, ja que el diàmetre superior (hi ha dues zones) calculat segons el "Tray sizing" és de 0,6096 metres. A més, les columnes de rebliment són més barates i treballen millor amb fluids corrosius.

El Hysys permet escollir el tipus de rebliment i el material. Se sap que a mesura que el diàmetre del rebliment és més gran l'alçada de la columna augmenta. . En aquest cas, es decideix no utilitzar HASTELLOY® alloy B-2 pel rebliment ja que fent servir rebliment d'aquest material (metall al Hysys) s'obté una relació alçada-diàmetre massa gran, obtenint una columna molt llarga en relació amb el diàmetre, que pot provocar problemes en la circulació del flux o camins preferencials. Per tant, es decideix utilitzar com a material ceràmica ja que permet tenir la mateixa eficiència amb menys alçada de rebliment, a més s'ha trobat bibliogràficament que aquest material permet treballar amb els compostos que hi intervenen en la destil·lació. Tot i així, encara que hi haguessin problemes de corrosió en el rebliment, aquest es podria canviar per un nou sense gaire problemes. És per això que s'ha fet la carcassa de la columna de HASTELLOY® alloy B-2 i el rebliment de ceràmica.

Es decideix utilitzar Raschig Rings i s'escull la seva mida segons la taula 12.7.6.6. Segons el "Tray Sizing", la columna tindrà dues zones amb dos diàmetres diferents. La zona inferior amb un diàmetre de 0,6096 metres i la superior amb 0,4572 metres.

**Taula 12.7.6.6** Mida del rebliment segons el diàmetre de la columna.

Mida del rebliment (polzades)	Diàmetre de la columna (m)
1/2" - 5/8"	0,1524 - 0,3048
5/8" - 1"	0,3048 - 0,4572
1" - 1 <sup>1/2</sup> "	0,4572 - 0,6096
1 <sup>1/2</sup> " - 2"	0,6096 - 1,2192
2" - 3"	>1,2192

Es decideix utilitzar Raschig Rings d'una polzada distribuït de manera aleatòria, ja que aquest és vàlid per a les dues zones de treball i permet obtenir una alçada de rebliment correcte en funció del diàmetre.

A la figura 12.7.6.12 es presenta el rebliment utilitzat en la columna CD-401.



**Figura 12.7.6.12.** Rebliment utilitzat en la columna CD-401. Raschig Rings.

A la taula 12.7.6.7 es presenten els paràmetres del disseny del Hysys per la columna CD-401.

**Taula 12.7.6.7.** Paràmetres de disseny del Hysys del dimensionat de la columna CD-401.

	Zona superior	Zona inferior
<b>Elements interns de la columna</b>		
Tipus de rebliment	Raschig Rings (ceràmica, aleatori) 1 polzada	Raschig Rings (ceràmica, aleatori) 1 polzada
Correlació inundació	SLEv73	SLEv73
Correlació HETP	Hands	Hands
Número de peces de rebliment	28208	22569
Pes del rebliment (Kg)	396,2	317,0
Estimació del cost del rebliment (\$)	301,6	241,3
<b>Geometria de la columna</b>		
Diàmetre (m)	0,4572	0,6096
Àrea transversal (m <sup>2</sup> )	0,1642	0,2919
Alçada del rebliment (m)	3,602	1,621
<b>Resultats hidràulics</b>		
Inundació màxima (%)	56,040	64,230
Pèrdua de càrrega (Kpa)	1,089	0,555
Pèrdua de càrrega per metre de	0,302	0,342
Velocitat del gas (m <sup>3</sup> /h·m <sup>2</sup> )	3588	2510
Velocitat del gas (m/s)	0,997	0,697

Per comprovar els resultats obtinguts amb el Hysys, es comprova el diàmetre de la columna obtingut mitjançant el mètode teòric que utilitza el gràfic d'Eckert, presentat a la figura 12.7.6.13

Degut a l'existència de dos zones amb diàmetres diferents, es fa necessari realitzar el mètode teòric dues vegades, per la zona superior i per la zona inferior.

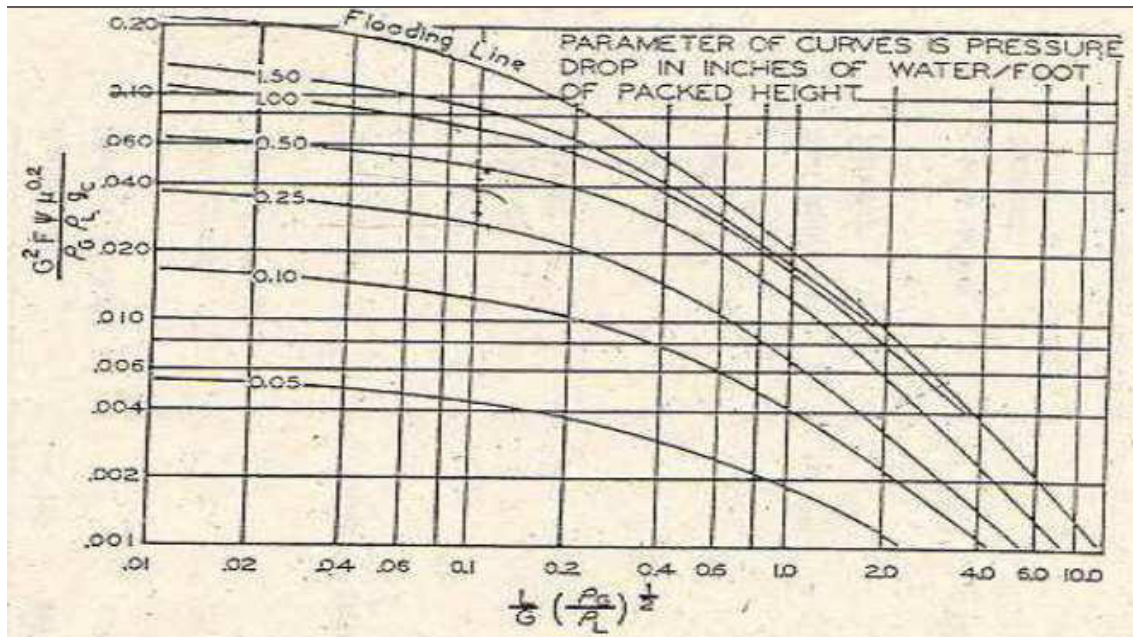


Figura 12.7.6.13. Gràfic d'Eckert

Per poder trobar el diàmetre, primerament es troba el valor de l'eix de les abscisses, definit per l'equació 12.7.6.9.

$$\frac{L}{G} \cdot \left( \frac{\rho_G}{\rho_L} \right)^{1/2} \quad \text{Equació 12.7.6.9}$$

on,

L: cabal total de líquid (kmols/h)

G: cabal total de gas (kmols/h)

$\rho_G$ : densitat del gas (lb/ft<sup>3</sup>)

$\rho_L$ : densitat del líquid (lb/ft<sup>3</sup>)

Com que el cabals de líquid i de gas no són constants en la columna es calcula el diàmetre en dos parts de cada zona de la columna, la part superior i la part inferior, utilitzant els cabals donats pel Hysys. A la taula 12.7.6.8 es presenten els paràmetres de l'equació 12.7.6.9 utilitzats per cada zona on es calcula el diàmetre.

**Taula 12.7.6.8.** Paràmetres de l'equació 12.7.6.9 utilitzats per cada zona on es calcula el diàmetre.

	ZONA SUPERIOR (Etapa 1-16)		ZONA INFERIOR (Etapa 17-31)	
	Part superior	Part inferior	Part superior	Part inferior
L (kmols/h)	6,597	5,189	25,653	27,445
G (kmols/h)	13,193	11,785	13,687	15,478
PG (lb/ft <sup>3</sup> )	0,1429	0,1533	0,1698	0,1909
PL (lb/ft <sup>3</sup> )	47,59	47,61	48,26	47,31

A la taula 12.7.6.9 es presenta el valor de les abscisses per les dues zones calculades amb els valors dels paràmetres de la taula 12.7.6.8

**Taula 12.7.6.9.** Valor de les abscisses pel gràfic d'Eckert.

	ZONA SUPERIOR (Etapa 1-16)		ZONA INFERIOR (Etapa 17-31)	
	Part superior	Part inferior	Part superior	Part inferior
Hg Valor abscisses	0,0274	0,0250	0,1112	0,1126

Considerant que la columna treballa a un 50% de la seva velocitat d'inundació s'arriba a una valor de l'eix d'ordenades, i mitjançant l'equació 12.7.6.10 es calcula el valor del cabal del gas en unitats de cabal dividides per l'àrea de pas, que permet obtenir aquesta última.

**Taula 12.7.6.10.** Valor de les ordenades pel gràfic d'Eckert.

	ZONA SUPERIOR (Etapa 1-16)		ZONA INFERIOR (Etapa 17-31)	
	Part superior	Part inferior	Part superior	Part inferior
Valor d'ordenades (Eckert)	0,0600	0,0610	0,0500	0,0450

Mitjançant l'equació 12.7.6.10 es pot calcular el valor de G per cada zona.

$$\frac{G^2 \cdot F \cdot \varphi \cdot \mu^{0,2}}{\rho_G \cdot \rho_L \cdot g_C} \quad \text{Equació 12.7.6.10}$$

on:

G: flux de gas (lb/s·ft<sup>2</sup>)

F: factor d'ompliment

$\varphi$  : relació entre la densitat de l'aigua i la del líquid

$\mu$ : viscositat del líquid (cP)

$g_C$ : constant de gravetat (32lb·ft/lb<sub>r</sub>·s<sup>2</sup>)

Mitjançant l'equació 12.7.6.11 es pot calcular el valor de l'àrea de la columna, amb la que es pot obtenir el diàmetre per cada zona, com es presenta a la taula 12.7.6.11.

$$A = \frac{G \left( \frac{\text{lb}}{\text{s}} \right)}{G \left( \frac{\text{lb}}{\text{s} \cdot \text{ft}^2} \right)} \quad \text{Equació 12.7.6.11}$$

**Taula 12.7.6.11.** Paràmetres necessaris per al càlcul del diàmetre de la columna CD-401. Valor del diàmetre trobat per a les dues zones.

	ZONA SUPERIOR (Etapa 1-16)		ZONA INFERIOR (Etapa 17-31)	
	Part superior	Part inferior	Part superior	Part inferior
F	160,000	160,000	160,000	160,000
$\varphi$	1,3118	1,3113	1,2936	1,3196
$\mu$ (cP)	0,2856	0,2685	0,2623	0,2391
$\rho_G$ (lb/ft <sup>3</sup> )	0,1429	0,1533	0,1698	0,1909
$\rho_L$ (lb/ft <sup>3</sup> )	47,5900	47,6100	48,2600	47,3100
gc	32,0000	32,0000	32,0000	32,0000
G (lb/s·ft <sup>2</sup> )	0,2827	0,2972	0,2877	0,2864
G (lb/hr)	1659,50	1787,06	2386,87	3152,59
A (ft <sup>2</sup> )	1,6305	1,6702	2,3043	3,0580
<b>D (m)</b>	0,4323	0,4375	0,5139	0,5920

Es compara el valor del diàmetre obtingut per les dues zones de manera teòrica i amb el Hysys a la taula 12.7.6.12. Com a valor final, s'agafa el del Hysys ja que és el diàmetre més gran i, per tant, el més conservatiu.

**Taula 12.7.6.12.** Valors del diàmetre de la columna CD-401 obtinguts per les dues zones pel mètode teòric i amb el Hysys.

	TEÒRIC				HYSYS	
	ZONA SUPERIOR (Etapa 1-16)		ZONA INFERIOR (Etapa 17-31)		ZONA SUPERIOR (Etapa 1-16)	ZONA INFERIOR (Etapa 17-31)
	Part superior	Part inferior	Part superior	Part inferior		
<b>D (m)</b>	<b>0,432</b>	<b>0,437</b>	<b>0,514</b>	<b>0,592</b>	<b>0,4572</b>	<b>0,6096</b>

S'observa com per la zona superior s'obté un diàmetre una mica més gran amb el disseny teòric. Com que els diàmetres són semblants i s'obté un diàmetre superior en la part inferior amb el Hysys es decideix continuar amb el dissenyat amb el programa.

La columna de destil·lació CD-401 s'ha dissenyat a través del programa Hysys, que utilitza dades teòriques que té a la seva base de dades. A l'hora de construir la columna, és aconsellable treballar amb un marge de seguretat, consistent en realitzar un sobredimensionat de la columna, per tal d'obtenir la separació desitjada en cas que el seu comportament fos diferent al teòric. L'eficiència de separació està directament relacionada amb l'alçada de rebliment a la columna, per tant el sobredimensionament ve donat per una augment en l'alçada en el rebliment. Pel cas de les columnes, es decideix sobredimensionar en un 25% sobre l'alçada de rebliment, tal com s'indica a continuació.

h rebliment superior= h rebliment Hysys · 1,25 = 3,602 m · 1,25 = **4,503 m**

h rebliment inferior= h rebliment Hysys · 1,25 = 1,621 m · 1,25 = **2,026 m**

S'ha de tenir en compte que al augmentar l'alçada de rebliment, la pèrdua de càrrega serà més gran. El Hysys dona la pèrdua de càrrega en funció de l'alçada, per tant es pot realitzar el càlcul considerant l'alçada sobredimensionada.

Part superior: 0,302 KPa/m · 4,503 m = **1,360 KPa**

Part inferior: 0,342 KPa/m · 2,026 m = **0,693 KPa**

Altra paràmetre que varia és el nombre de peces i el pes d'aquestes. Per poder adaptar-ho a l'alçada sobredimensionada s'utilitza l'alçada antiga, juntament amb el pes i el nombre de peces donades pel Hysys, tal com s'indica a continuació.

Part superior:

$$28208 \text{ peces} \cdot \frac{4,503 \text{ m}}{3,602 \text{ m}} = \mathbf{35264 \text{ peces}}$$

$$396,2 \text{ Kg peces} \cdot \frac{4,503 \text{ m}}{3,602 \text{ m}} = \mathbf{495 \text{ Kg peces}}$$

Part inferior:

$$22569 \text{ peces} \cdot \frac{2,026 \text{ m}}{1,621 \text{ m}} = \mathbf{28208 \text{ peces}}$$

$$317,0 \text{ Kg peces} \cdot \frac{2,026 \text{ m}}{1,621 \text{ m}} = \mathbf{396 \text{ Kg peces}}$$

### 12.7.6.3 Disseny mecànic

L'alçada de la columna de destil·lació no només ve donada per l'alçada necessària de rebliment, sinó que s'han de tenir en compte altres factors com l'espai superior i inferior necessari o el suport per al rebliment. A més, es divideix el rebliment en dos zones separades per un redistribuïdor, que permet millorar el funcionament de la torre. La divisió en dos zones també evita la compactació i la formació de camins preferencials.

A continuació es detallen els diferents elements que contindrà la columna al seu interior que no s'han tingut en compte en el disseny amb el Hysys, per fer-ho s'utilitza la guia donada per la casa "Saint-Gobain Norpro":

- **Distribuïdor de líquid**, s'utilitza el mateix que en la columna d'absorció AB-301, ja que segons la casa "Saint-Gobain Norpro" és vàlid per al diàmetre de treball de la columna CD-401. A l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, es troba l'explicació detallada d'aquest distribuïdor.
- **Redistribuïdor de líquid**, s'utilitza el mateix que en la columna d'absorció AB-301, ja que segons la casa "Saint-Gobain Norpro" és vàlid per al diàmetre de treball de la columna CD-401. A l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, es troba l'explicació detallada d'aquest redistribuïdor.
- **Reixetes de suport**, s'utilitzen els mateixos que en la columna d'absorció AB-302, ja que segons la casa "Saint-Gobain Norpro" són vàlids per al diàmetre de treball de la columna CD-401. A l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, es troba l'explicació detallada de les reixetes de suport.
- **Limitadors de rebliment**, com en el cas de l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, s'ha de comprovar la necessitat de posar limitadors en la columna CD-401, utilitzant la taula presentada de l'apartat 11.4.6.1.3 tal com indica la casa "Saint-Gobain Norpro".



Zona superior:

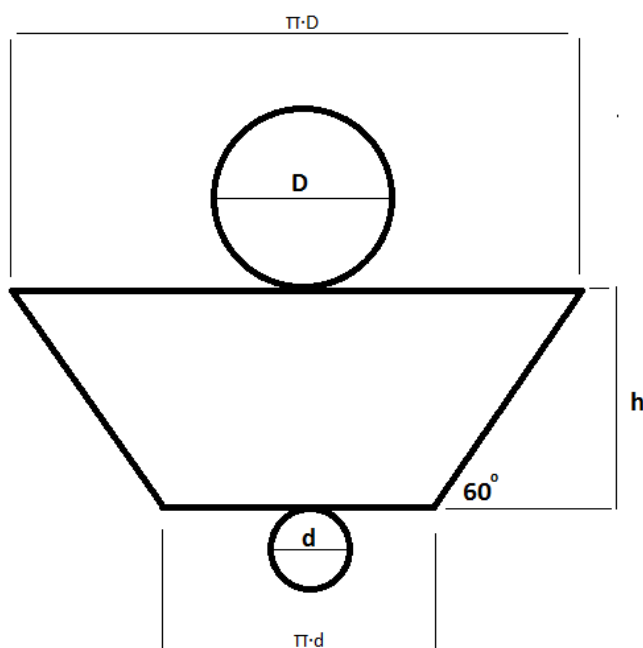
La variació de pressió en la columna és de 0,369 in. WC/ft i la densitat del rebliment de 41,533 lbs/ft<sup>3</sup>, per tant, no és necessari utilitzar limitadors de rebliment en la columna.

Zona inferior:

La variació de pressió en la columna és de 0,417 in. WC/ft i la densitat del rebliment de 41,537 lbs/ft<sup>3</sup>, per tant, no és necessari utilitzar limitadors de rebliment en la columna.

- **Boques d'home**, s'utilitzen les mateixes boques d'home pel que fa al model, quantitat i posició que en la columna d'absorció AB-301. A l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, es troba l'explicació detallada de les boques d'home utilitzades.
- Mecànicament el canvi de diàmetre entre les dues zones es fa mitjançant un conus que s'anomenarà **adaptador de diàmetre**.

Aquest adaptador es dissenya de tal manera que el conus ha de tenir una inclinació de 60°. Per tant, es determina la seva llargada tal com es presenta a la figura 12.7.6.14



**Figura 12.7.6.14** Càlcul de l'alçada de l'adaptador.

Per tant,

$$\tan(60^{\circ}C) = \frac{h}{(\pi \cdot D - \pi \cdot d)/2} = \frac{h}{(\pi \cdot 0,6096 \text{ m} - \pi \cdot 0,4572\text{m})/2} = \frac{h}{0,2394 \text{ m}}$$

Per tant,

$$h = 0,415 \text{ metres}$$

Cal tenir en compte l'espai necessari que s'ha de deixar en la part inferior de la columna, entre les dues zones de rebliment i en la part superior de la columna; a més, cal deixar un espai entre els distribuïdors i els rebliments. Aquests espais depenen de la zona de treball, tal com s'indica a continuació:

- 1 metre entre el distribuïdor superior i el capçal superior.
- 0,75 metres per sota del distribuïdor superior.
- 1,5 metres entre les dues zones de rebliment per sobre del redistribuïdor inferior, incloent l'adaptador.
- 0,75 metres per sota del distribuïdor inferior.
- 2 metre entre el suport de rebliment inferior i el capçal inferior.

Per tant, es pot calcular l'alçada total del cos de la columna, tal com s'indica a continuació:

$$\begin{aligned} h_{cos} &= h_{\text{espai superior}} + h_{\text{distribuïdor}} + h_{\text{espai dist-rebl}} + \\ &h_{\text{rebliment superior}} + h_{\text{suport}} + h_{\text{espai intermedi}} + h_{\text{redistribuïdor}} \\ &+ h_{\text{espai dist-rebl}} + h_{\text{rebliment inferior}} + h_{\text{suport}} + h_{\text{espai inferior}} = \\ &= 1000 \text{ mm} + 450 \text{ mm} + 750 \text{ mm} + 4503 \text{ mm} + 114 \text{ mm} + 1500 \text{ mm} + \\ &+ 450 \text{ mm} + 750 \text{ mm} + 2026 \text{ mm} + 114 \text{ mm} + 2000 \text{ mm} = 13657 \text{ mm} \end{aligned}$$

Per tal d'abaratir costos es decideix fer la columna de 14 metres, ja que serà més fàcil i econòmic trobar un proveïdor que vengui la xapa d'aquesta longitud i no de 13,657 m.

La longitud que falta s'afegeix a la dels espais buits superior per sobre del distribuïdor, intermedi per sobre del distribuïdor i inferior sota del limitador, ja que això no afectarà al funcionament de la columna. S'obté un espai de 1114 mm pel superior, 1614 mm per l'intermedi i 2115 mm per l'inferior.

A continuació es dissenya la columna de destil·lació CD-401 mitjançant el codi ASME, es realitza el càlcul per a la carcassa cilíndrica i per als fons toriesfèrics.

### **Pressió de disseny**

La pressió de disseny per a la es calcula aplicant la norma següent:

$$Pressió\ de\ disseny = \max(1,1 \cdot P.\ operació, P.\ operació + 2atm)$$

$$Pressió\ de\ disseny = \max(1,1atm, 3atm) = 3atm$$

Per tant, sabent que la pressió d'operació és 1 atmosfera (disseny funcional amb el Hysys) es pot calcular la pressió de disseny.

Pressió operació = 1atm.

Pressió de disseny = **3atm**.

### **Temperatura de disseny**

En aquest cas, la temperatura de disseny be donada pel disseny funcional (Hysys). A continuació es presenten les temperatures d'operació per caps i cues de la columna:

Temperatura d'operació caps = 38,79 °C

Temperatura d'operació cues = 108,10 °C

La temperatura de disseny be donada:

$$Temperatura\ de\ disseny = \max(80^{\circ}C, T.\ operació, +15^{\circ}C)$$

Temperatura de disseny caps = **80,00 °C**

Temperatura de disseny cues = **123,10 °C**

### **Material**

Per decidir quin és el millor material per la columna CD-401 cal tenir en compte que es treballa amb HCl i la corrosió que aquest compost produeix és elevada, consultant la taula de la figura 12.7.6.15 s'escull **HASTELLOY® alloy B-2** amb una corrosió menor de 0,508mm/any.

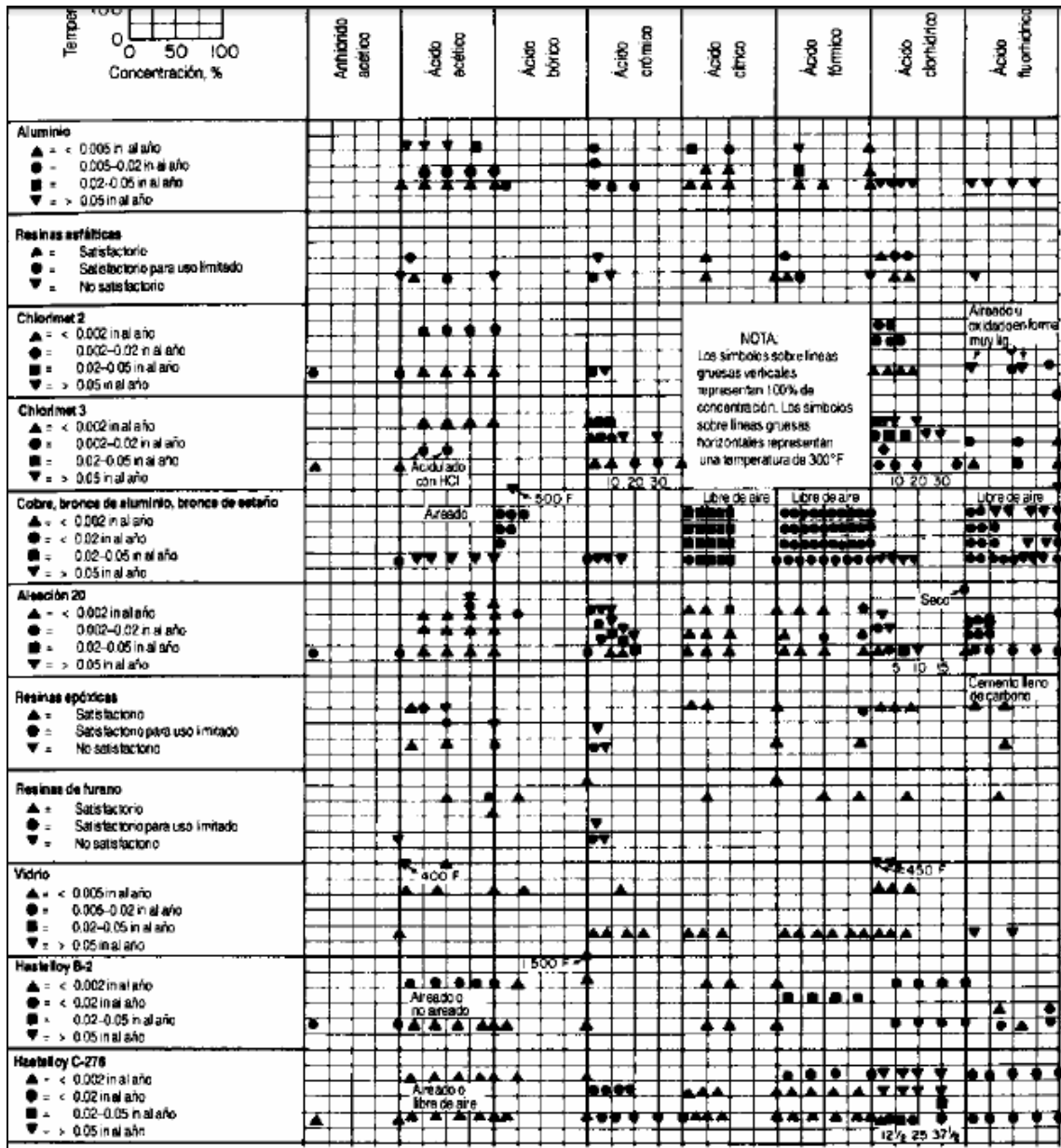


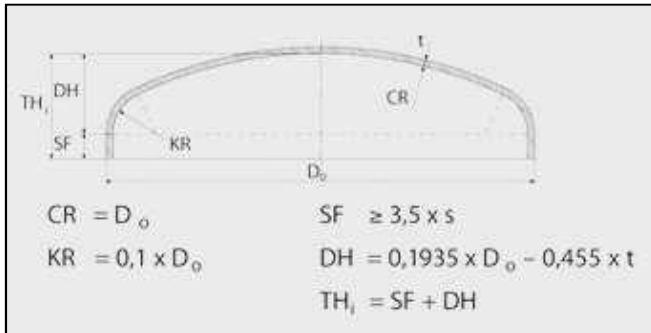
Figura 12.7.6.15 Dades detallades de corrosió en materials de construcció [Perrys Handbook]

**Esponsor del fondo i el capçal. Càlcul a pressió interna**

Els tipus de fonsos i capçals més utilitzats són el toriesfèric, l'hemisfèric i l'el·lipsoidal, la seva elecció depèn de les condicions d'operació i el cost econòmic, en aquest cas s'utilitza el toriesfèric.

Fondo superior

Aquest fons ve definit pel radi de la corona (L) i el radi del colze (r) que es calculen respecte al diàmetre del cos donat pel Hysys, tal com indica la casa “Koenig-co” en la figura 12.7.6.16, extreta de la seva pàgina web.



**Figura 12.7.6.16.** Esquema del fons torièsferic per tal de determinar l'alçada del fons de la columna de destil·lació CD-401.  $s=t$ .

Per tant,

$$L = D = 457,2 \text{ mm} = 457,2 \text{ mm}$$

$$r = 0,1 \cdot D = 0,1 \cdot 457,2 \text{ mm} = 45,72 \text{ mm}$$

$$\frac{L}{r} = 10$$

Per una relació  $L/r$  menor de  $16^{2/3}$  l'espessor es calcula amb l'equació 12.7.6.12.

$$t = \frac{P \cdot L \cdot M}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad \text{Equació 12.7.6.12}$$

on:

t = espessor del fondo (mm)

P = pressió de disseny del recipient (bar) = 3

M = factor que depèn de la relació  $L/r$ , en aquest cas igual a 1,54

E = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)

S = càrrega admissible del material (bar) = 7583,4 bar

L = radi de la corona (mm) = 457,2

El sobre espessor per corrosió del material és de 0,508mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobre espessor serà 7,62 mm.

$C_1$  = marge per corrosió (mm) = 7,62 mm

$C_2$  = tolerància de fabricació (mm) = 10% de l'espessor

El resultat és de 8,56 mm, però donat que els espessors estàndards de xapa a Europa són: 3, 4, 5, 6, 8, 10, 12, 15, 20..., s'agafa un espessor dels fondos de 10 mm.

***espessor del capçal = 10mm***

### Fondo inferior

Aquest fons ve definit pel radi de la corona (L) i el radi del colze (r) que es calculen respecte al diàmetre del cos donat pel Hysys, tal com indica la casa "Koenig-co" en la figura 12.7.6.12, extreta de la seva pàgina web.

Per tant,

$$L = D = 609,6 \text{ mm} = 609,6 \text{ mm}$$

$$r = 0,1 \cdot D = 0,1 \cdot 609,6 \text{ mm} = 60,96 \text{ mm}$$

$$\frac{L}{r} = 10$$

Per una relació L/r menor de  $16 \frac{2}{3}$  l'espessor es calcula amb l'equació 12.7.6.13.

$$t = \frac{P \cdot L \cdot M}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad \text{Equació 12.7.6.13}$$

on:

t = espessor del fondo (mm)

P = pressió de disseny del recipient (bar) = 3

M = factor que depèn de la relació L/r, en aquest cas igual a 1,54

E = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)

S = càrrega admissible del material (bar) = 7583,4 bar

L = radi de la corona (mm) = 609,6

El sobre espessor per corrosió del material és de 0,508mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobreespessor serà 7,62 mm.

$C_1$  = marge per corrosió (mm) = 7,62 mm

$C_2$  = tolerància de fabricació (mm) = 10% de l'espessor

El resultat és de 8,62 mm, però donat que els espessors estàndards de xapa a Europa són: 3, 4, 5, 6, 8, 10, 12, 15, 20..., s'agafa un espessor dels fondos de 10 mm.

***espessor del fondo = 10mm***

### **Espessor del cos de la columna. Càlcul a pressió interna**

L'equació 12.7.6.14 permet trobar l'espessor del cos de la columna. Es calcula l'espessor amb el radi més gran de la columna, ja que serà el més conservatiu.

$$t_1 = \frac{P \cdot R_{int}}{S \cdot E - 0,6 \cdot P} + C \cdot A \quad \text{Equació 12.7.6.14}$$

on:

$t_1$  = espessor del cos (mm)

P = pressió de disseny del recipient (bar) = 3

$R_{int}$  = radi intern de la columna (mm) = 304,8

E = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)

S = càrrega admissible del material (bar) = 7583,4 bar

C.A = sobreesspessor (mm)

La tolerància de fabricació pel cas d'un cilindre és nul·la i el sobre espessor per corrosió del material és de 0,508mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobreesspessor serà 7,62 mm.

El resultat és de 7,76 mm, però donat que els espessors estàndards de xapa a Europa són: 3, 4, 5, 6, 8, 10, 12, 15, 20..., s'agafa un espessor del cos de 8 mm.

***espessor dels cos de la columna = 8 mm***

**Alçada dels fondo i el capçal****Alçada del capçal**

Una vegada determinats els espessors del cos i els fondo i capçal es pot determinar l'alçada del capçal per determinar l'alçada total de l'equip, tal com indica la casa "Koenig-co" en la figura 12.7.6.16, extreta de la seva pàgina web.

$$DH = 0,1935 \cdot D_o - 0,455 \cdot t \quad \text{Equació 12.7.6.15}$$

$$SF = 3,5 \cdot s \quad \text{Equació 12.7.6.16}$$

$$TH = SF + DH \quad \text{Equació 12.7.6.17}$$

Es calcula l'alçada del capçal toriesfèric sense tenir en compte l'espessor de la xapa, tal com s'indica a continuació:

$$DH = 0,1935 \cdot 457,2 \text{ mm} - 0,455 \cdot 10 \text{ mm} = 83,92 \text{ mm}$$

$$SF = 3,5 \cdot 10 \text{ mm} = 35 \text{ mm}$$

$$TH = 35 \text{ mm} + 83,92 \text{ mm} = 118,92 \text{ mm}$$

**Alçada del fondo**

Una vegada determinats els espessors del cos i els fondo i capçal es pot determinar l'alçada del fondo per determinar l'alçada total de l'equip.

Es calcula l'alçada del fondo toriesfèric sense tenir en compte l'espessor de la xapa, tal com s'indica a continuació:

$$DH = 0,1935 \cdot 609,6 \text{ mm} - 0,455 \cdot 10 \text{ mm} = 113,41 \text{ mm}$$

$$SF = 3,5 \cdot 10 \text{ mm} = 35 \text{ mm}$$

$$TH = 35 \text{ mm} + 113,41 \text{ mm} = 148,41 \text{ mm}$$

Per tant, l'alçada de la columna sense l'espessor és de **14267 mm**.

**12.7.6.4 Pes de la columna****Pes de la columna buida**

- 1) Es calcula el volum del capçal de la columna mitjançant l'equació 12.7.6.18.

$$Vi = 0,1 \cdot (D_{col \text{ superior}}^3) \quad \text{Equació 12.7.6.18}$$



Per tant,

$$V_i = 0,1 \cdot (457,2 \text{ mm})^3 = 0,00956 \text{ m}^3$$

Per calcular el pes dels capçals, es calcula el volum extern del capçal, mitjançant l'equació 12.7.6.19.

$$V_e = 0,1 \cdot ((D_{col} + 2 \cdot t)^3) \text{ **Equació 12.7.6.19**}$$

Per tant,

$$V_e = 0,1 \cdot (457,2 \text{ mm} + 2 \cdot 10 \text{ mm})^3 = 0,01087 \text{ m}^3$$

Per tant, la resta correspon al volum de la paret del capçal:

$$V_{paret, capçal} = 0,01087 \text{ m}^3 - 0,00956 \text{ m}^3 = 0,00131 \text{ m}^3$$

2) Es calcula el volum del fondo de la columna mitjançant l'equació 12.7.6.20.

$$V_i = 0,1 \cdot (D_{col superior})^3 \quad \text{**Equació 12.7.6.20**}$$

Per tant,

$$V_i = 0,1 \cdot (609,6 \text{ mm})^3 = 0,02265 \text{ m}^3$$

Per calcular el pes del fondo, es calcula el volum extern del fondo, mitjançant l'equació 12.7.6.21.

$$V_e = 0,1 \cdot ((D_{col} + 2 \cdot t)^3) \text{ **Equació 12.7.6.21**}$$

Per tant,

$$V_e = 0,1 \cdot (609,6 \text{ mm} + 2 \cdot 10 \text{ mm})^3 = 0,02496 \text{ m}^3$$

Per tant, la resta correspon al volum de la paret del fondo:

$$V_{paret, fondo} = 0,02496 \text{ m}^3 - 0,02265 \text{ m}^3 = 0,00231 \text{ m}^3$$

3) Es calcula el volum de la paret del cos superior:

$$V_i = \pi \cdot \left(\frac{D_{col}}{2}\right)^2 \cdot h = \pi \cdot \left(\frac{457,2 \text{ mm}}{2}\right)^2 \cdot 7831 \text{ mm} = 1,286 \text{ m}^3$$

$$V_e = \pi \cdot \left(\frac{D_{col} + 2 \cdot t}{2}\right)^2 \cdot h = \pi \cdot \left(\frac{457,2 \text{ mm} + 2 \cdot 8 \text{ mm}}{2}\right)^2 \cdot 7831 \text{ mm} \\ = 1,377 \text{ m}^3$$

$$V_{paret} = 1,377 \text{ m}^3 - 1,286 \text{ m}^3 = 0,091 \text{ m}^3$$

4) Es calcula el volum de l'adaptador:

$$V_i = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot h \cdot (R^2 + r^2 + R \cdot r) = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot 0,415 \text{ m} \\ \cdot ((0,3048 \text{ m})^2 + (0,2286 \text{ m})^2 + 0,3048 \text{ m} \cdot 0,2286 \text{ m}) = 0,0934 \text{ m}^3$$

$$V_e = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot h \cdot ((R + t)^2 + (r + t)^2 + (R + t) \cdot (r + t)) = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot 0,415 \text{ m} \\ \cdot ((0,3048 \text{ m} + 0,008 \text{ m})^2 + (0,2286 \text{ m} + 0,008 \text{ m})^2 + (0,3048 \text{ m} + 0,008 \text{ m}) \\ \cdot (0,2286 \text{ m} + 0,008 \text{ m})) = 0,0990 \text{ m}^3$$

$$V_{\text{paret}} = 0,0990 \text{ m}^3 - 0,0934 \text{ m}^3 = 0,0056 \text{ m}^3$$

5) Es calcula el volum de la paret del cos inferior:

$$V_i = \pi \cdot \left(\frac{D_{\text{col}}}{2}\right)^2 \cdot h = \pi \cdot \left(\frac{609,6 \text{ mm}}{2}\right)^2 \cdot 5754 \text{ mm} = 1,679 \text{ m}^3$$

$$V_e = \pi \cdot \left(\frac{D_{\text{col}} + 2 \cdot t}{2}\right)^2 \cdot h = \pi \cdot \left(\frac{609,6 \text{ mm} + 2 \cdot 8 \text{ mm}}{2}\right)^2 \cdot 5754 \text{ mm} \\ = 1,769 \text{ m}^3$$

$$V_{\text{paret}} = 1,769 \text{ m}^3 - 1,679 \text{ m}^3 = 0,090 \text{ m}^3$$

S'obté un volum total de paret de 0,1902 m<sup>3</sup>.

Sabent que la densitat del Hastelloy B2 és de 9220 Kg/m<sup>3</sup>, es pot calcular el pes de la columna buida, tal com s'indica a continuació:

$$0,1902 \text{ m}^3 \cdot \frac{9220 \text{ Kg}}{1 \text{ m}^3} = 1754 \text{ Kg}$$

Es considera que el pes dels elements interns és del 10 % del total del pes de l'equip buit, tal com s'indica a continuació.

$$\text{Pes elements interns} = 0,1 \cdot 1754 \text{ Kg} = 175,4 \text{ Kg}$$

El pes del reblliment ve donat pel Hysys i és de 891 Kg, per tant es calcula el pes total de la columna buida:

$$\text{Pes buit} = 1754 \text{ Kg} + 175,4 \text{ Kg} + 891 \text{ Kg} = \mathbf{2820 \text{ Kg}}$$

**Pes de la columna plena d'aigua**

Es calcula el volum de la columna sumant el volums dels capçals, l'adaptador i el cos:

$$V_{col} = 0,00956 m^3 + 0,02265 m^3 + 1,286 m^3 + 0,0934 m^3 + 1,679 m^3 = 3,091 m^3$$

Per tant, amb la densitat de l'aigua a la temperatura de 25°C i el pes de la columna buida es pot calcular el pes de la columna amb aigua:

$$Pes_{col aigua} = 2820 Kg + 3,091 m^3 \cdot \frac{997,13 Kg}{1 m^3} = 5902 Kg$$

**Pes de la columna en operació**

A partir de la densitat mitjana del fluid d'operació es calcula el pes de la columna en operació:

$$Pes_{col operació} = 2820 Kg + 3,091 m^3 \cdot \frac{381,412 Kg}{1 m^3} = 3999 Kg$$

**12.7.6.5 Aïllament**

Degut a que la temperatura d'operació de l'equip és superior a 60°C cal aïllar l'equip amb llana de vidre. Es realitza el càlcul pel capçal (encara que la temperatura no supera els 60°C s'aïlla ja que s'aïlla tot l'equip) i pel fondo de manera independent amb l'equació .

$$X = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{\Delta T}{D_{ext}}\right)^{\frac{1}{4}}} \quad \text{Equació 12.7.6.22}$$

on:

X = espessor de l'aïllant (cm)

$\Delta T$  = diferència de temperatura entre l'interior i l'exterior del recipient

$D_{ext}$  = diàmetre exterior del recipient (m)

**Taula 12.7.6.13** resultats obtinguts pel disseny a la part superior i inferior.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR
T disseny (°C)	80	123,1
$\Delta T$ (°C)	65	108,1
X (cm)	2,43	2,29

Es decideix augmentar el valor obtingut pel doble per assegurar un bon aïllament.

$$X_{sup} = 2,43 cm \times 2 = 4,86 cm$$

$$X_{inf} = 2,29 \text{ cm} \times 2 = 4,58 \text{ cm}$$

Pel que fa al cos de la columna i l'adaptador de diàmetres, s'aïllarà amb el més desfavorable, és a dir, 4,86 cm. Aquest aïllant quedarà recobert per una capa d'alumini per tal de protegir-lo de les inclemències meteorològiques.

Es calcula el volum de l'aïllant calculant el volum als fondos i al cos, els resultats es presenten a la taula 12.7.6.14.

**Taula 12.7.6.14** Càlcul del volum d'aïllant necessari en la columna CD-401

Volum aïllant capçal (m <sup>3</sup> )	0,008
Volum aïllant fondo (m <sup>3</sup> )	0,013
Volum aïllant cos (m <sup>3</sup> )	1,214
Volum aïllant adaptador (m <sup>3</sup> )	0,111
<b>Volum total (m<sup>3</sup>)</b>	<b>1,346</b>

## 12.7.7 Columna de destil·lació CD-601

### 12.7.7.1 Disseny funcional

Es dissenya aquesta torre de destil·lació amb la finalitat de recuperar el MIC que no ha reaccionat en el reactor R-501 per poder recircular-ho. Les composicions d'entrada venen definides per la sortida del reactor.

#### Disseny teòric

Es realitza el disseny teòric de la columna mitjançant el mètode de "Shorcut " teòric, que utilitza "Fenske", "Underwood" i la correlació de "Gilliand" per trobat el número d'etapes i l'etapa de l'aliment.

Prèviament, són necessàries les volatilitats relatives dels diferents compostos respecte el component clau pesat, és a dir, el toluè. La volatilitat relativa d'un compost ve

definida per l'equació 12.7.7.1. Com que la volatilitat depèn de la temperatura, s'utilitzarà una volatilitat relativa mitjana a la temperatura de l'aliment.

$$\alpha_{i,j} = \frac{k_i}{k_j} \text{ Equació 12.7.7.1}$$

on,

$\alpha_{i,j}$ : volatilitat relativa del component i respecte del component j

$k_i$ : constant d'equilibri del component i

$k_j$ : constant d'equilibri del component j (component de referència – heavy key)

S'extreuen les constants d'equilibri de cada compost amb el Hysys, com que a la temperatura de l'aliment la mescla és líquida el Hysys no dona cap valor de k, per tant, es puja la temperatura fins que hi ha vapor (115°C) i s'agafen aquests valors de constant d'equilibri. Encara que la constant d'equilibri varia fortament amb la temperatura, la volatilitat relativa depèn menys d'aquesta, ja que és el quocient de dos constants que varien en el mateix sentit.

**Taula 12.7.7.1** Constants d'equilibri per cada compost a la temperatura d'entrada de l'aliment.

Compost	k
MIC	7,8480
Toluè	1,1250
1-naftol	1,06E-08
Carbaril	3,95E-07

Per tant, a partir d'aquestes es poden calcular les volatilitats relatives de cada compost respecte el toluè, els resultats es presenten a la taula 12.7.7.2.

**Taula 12.7.6.2.** Volatilitats relatives respecte el MCC a la temperatura d'entrada a la columna CD-601.

Compost	$\alpha_{i, \text{toluè}}$
MIC	6,976
Toluè	1,000
1-naftol	9,40E-09
Carbaril	3,51E-07

Es fixa la fracció recuperada dels compostos claus que es vol obtenir en el destil·lat i en el residu, tal com s'indica a continuació.

$$FR_{\text{toluè},B} = 0,9920$$

$$FR_{\text{MIC},D} = 0,9999$$

Mitjançant l'equació de Fenske, presentada a continuació, es calcula el número mínim d'etapes necessàries per a la separació desitjada.

$$N_{\min} = \frac{\ln\left(\frac{FR_{LK,D} \cdot FR_{HK,B}}{(1-FR_{LK,D}) \cdot (1-FR_{HK,B})}\right)}{\ln(\alpha_{LK-HK})} \quad \text{Equació 12.7.7.2}$$

on,

$FR_{LK,D}$ : fracció recuperada del clau lleuger en el destil·lat

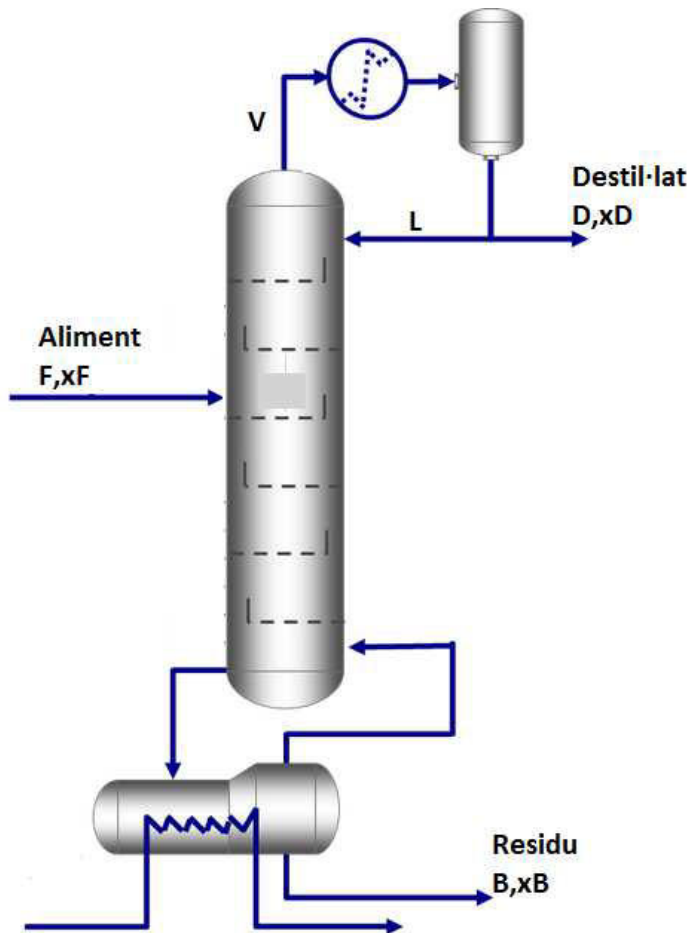
$FR_{HK,B}$ : fracció recuperada del clau pesat en el refinat

$(\alpha_{LK-HK})$ : volatilitat relativa del component clau lleuger respecte del component clau pesat.

Per tant,

$$N_{\min} = \frac{\ln\left(\frac{0,9999 \cdot 0,9920}{(1 - 0,9999) \cdot (1 - 0,9920)}\right)}{\ln(6,976)} = 7,223 \approx 8 \text{ etapes d'equilibri}$$

En aquest moment es fa necessari realitzar un balanç de matèria a la columna, mitjançant la figura 12.7.7.1.



*Figura 12.7.7.1. Esquema general de la columna de destil·lació CD-601.*

El balanç de matèria es presenta a continuació:

- Balanç de matèria global  
 $F=B+D$   
 $V=L+D$
- Balanç de matèria pel component i  
 $F \cdot x_{F,i} = B \cdot x_{B,i} + D \cdot x_{D,i}$

S'ordenen els components per la seva volatilitat (de  $k$  més alta a més baixa) en la taula 12.7.7.3 i es resol el balanç de matèria considerant que els no claus lleugers surten totalment per caps i els no claus pesats surten totalment per baix.

**Taula 12.7.7.3.** Balanç de matèria a la columna CD-601 una vegada imposades les fraccions recuperades dels components claus.

	Compost	k	z <sub>i,F</sub>	F·z <sub>i,F</sub>	x <sub>i,D</sub>	D·x <sub>i,D</sub>	x <sub>i,B</sub>	B·x <sub>i,B</sub>
LK	MIC	7,8480	0,0111	0,6503	0,6191	0,6502	0,0000	0,0001
HK	Toluè	1,1250	0,8534	49,9996	0,3809	0,4000	0,8620	49,5996
HNK	Carbaril	3,95E-07	0,1257	7,3652	0,0000	0,0000	0,1280	7,3652
HNK	1-naftol	1,06E-08	0,0098	0,5722	0,0000	0,0000	0,0099	0,5722
			<b>F</b> <b>(kmols/h)</b>	58,5873	<b>D</b> <b>(kmols/h)</b>	1,0502	<b>B</b> <b>(kmols/h)</b>	57,5371

Una vegada resolt el balanç de matèria, es calcula el (L/D)<sub>min</sub> mitjançant el mètode de Underwood, tal com s'indica a continuació:

$$(\Delta V)_F = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i \cdot F \cdot z_{i,F}}{\alpha_i - \emptyset} \quad \text{Equació 12.7.7.3}$$

On s'imposa  $(\Delta V)_F=0$  i es troba el valor de  $\emptyset$ , resolent l'equació 12.7.7.3.

El valor de  $\emptyset$  trobat és de 6,479; a partir d'aquest valor es calcula el valor de  $V_{\min}$  mitjançant l'equació 12.7.6.4.

$$(V)_{\min} = \sum_{i=1}^C \frac{\alpha_i \cdot D \cdot x_{i,D}}{\alpha_i - \emptyset} \quad \text{Equació 12.7.7.4}$$

Troba un valor de  $V_{\min}=9,052$  Kmols/h.

A partir del valor de  $V_{\min}$  es calcula  $(L/D)_{\min}$ , tal com s'indica en l'equació 12.7.7.5.

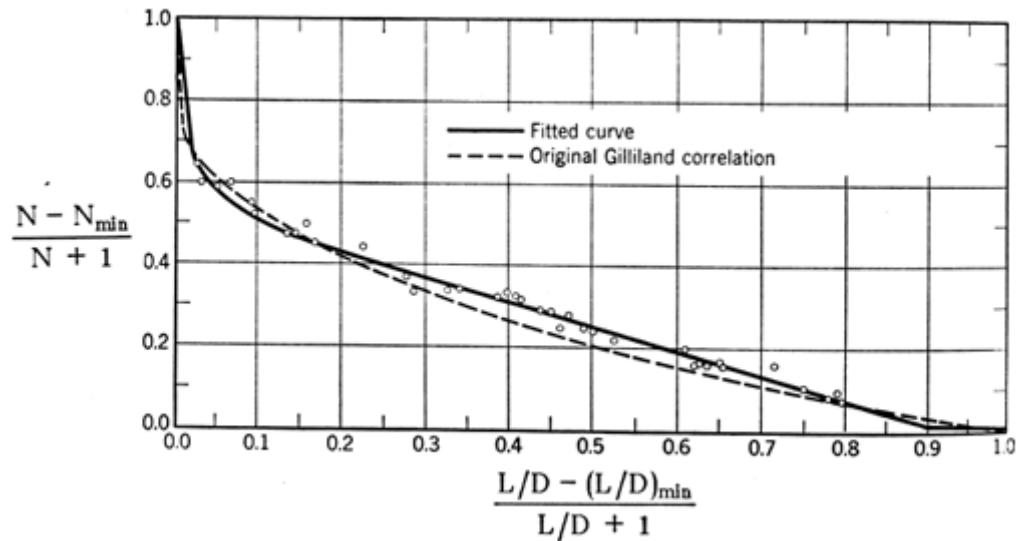
$$\left(\frac{L}{D}\right)_{\min} = \frac{(V)_{\min}}{D} - 1 \quad \text{Equació 12.7.7.5}$$

$$\text{Troba un valor de } \left(\frac{L}{D}\right)_{\min} = 7,619$$

$$\text{Considerant que } \left(\frac{L}{D}\right) = 1,2 \cdot \left(\frac{L}{D}\right)_{\min} = 9,143$$

Sabent el valor de  $\left(\frac{L}{D}\right)_{\min}$  i  $\left(\frac{L}{D}\right)$  es passa a utilitzar la correlació de Gilliland, presentada a la figura 12.7.7.2, que permet obtenir el número d'etapes d'equilibri necessàries a la columna.





**Figura 12.7.7.2.** Gràfic de la correlació de Gilliland per al càlcul del número d'etapes necessàries en la columna CD-601.

Sabent,

$$\frac{\frac{L}{D} - \left(\frac{L}{D}\right)_{\min}}{\frac{L}{D} + 1} = \frac{9,143 - 7,619}{9,143 + 1} = 0,15$$

Es troba el valor de les ordenades utilitzant "Original Gilliland correlation":

$$\frac{N - (N)_{\min}}{N + 1} = 0,45$$

Per tant, es troba un valor de **N de 16 etapes**.

Per trobar l'etapa de l'aliment mínima s'utilitza l'equació 12.7.6.6.

$$N_{F,\min} = \frac{\ln\left(\frac{\left(\frac{x_{LK}}{x_{HK}}\right)_D}{\frac{z_{LK}}{z_{HK}}}\right)}{\ln(\alpha_{LK-HK})} \quad \text{Equació 12.7.6.6}$$

on,

$z_{LK}$ : fracció molar del component clau lleuger a l'aliment

$z_{HK}$ : fracció molar del component clau pesat a l'aliment

Es resol l'equació 12.7.7.7:

$$N_{F,\min} = \frac{\ln\left(\frac{0,61910}{\frac{0,38090}{\frac{0,01110}{0,85340}}}\right)}{\ln(6,976)} = 2,486 \approx \text{Etapa 3}$$

Per trobar l'etapa de l'aliment s'utilitza l'equació 12.7.7.8, presentada a continuació.

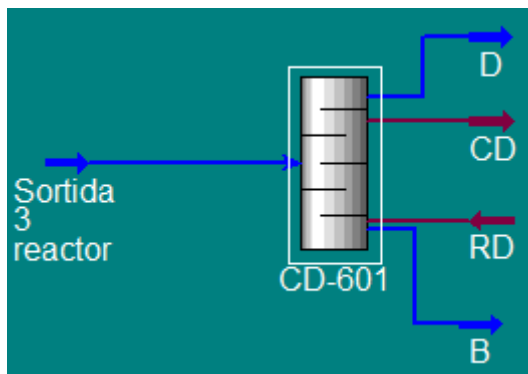
$$\frac{N_{F,\min}}{N_{\min}} = \frac{N_F}{N} \quad \text{Equació 12.7.7.8}$$

Per tant,

$$N_F = \frac{N_{F,\min}}{N_{\min}} \cdot N = \frac{3}{8} \cdot 16 = 6 = \text{Etapa 6}$$

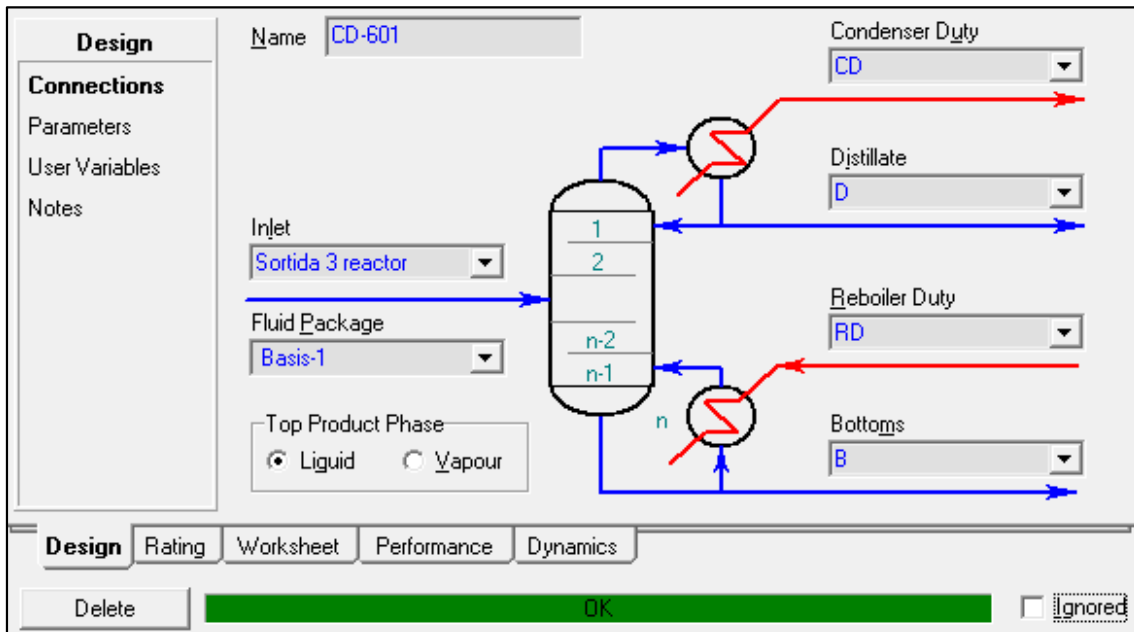
### **Disseny amb AspenTech "Hysys v 7.3"**

Es dissenya la columna de destil·lació CD-601 pel mètode "Shortcut Column", s'imposa una fracció molar del component clau pesat per caps de 0,4, ja que com hi ha molt poc MIC aquesta fracció molar fa que surti molt poc toluè per caps. Pel cas de component clau lleuger s'imposa una fracció molar per cues molt baixa (0,0001), ja que es vol obtenir una separació molt alta per separar la màxima quantitat de MIC. A la figura 12.7.7.3 es presenta l'esquema general utilitzat en el Hysys per realitzar el disseny de la columna de destil·lació CD-601.



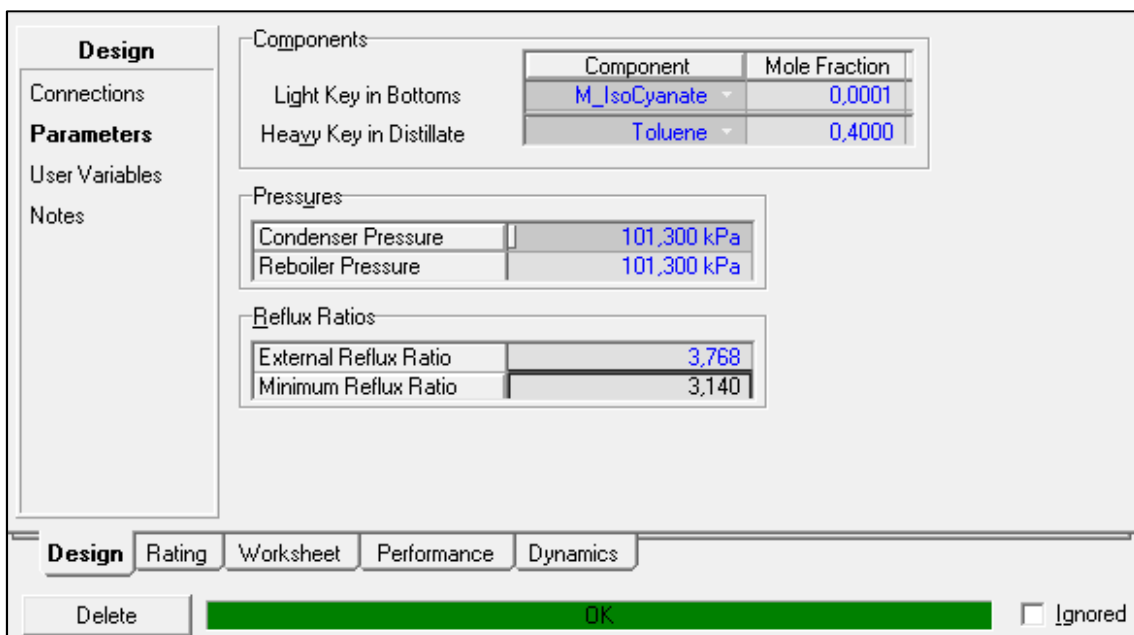
**Figura 12.7.7.3** Esquema general utilitzat en el Hysys pel disseny de la columna CD-601 pel mètode de "Shortcut Column"

A la figura 12.7.7.4 es presenta la pantalla principal utilitzada en el Hysys pel disseny de la columna CD-601 pel mètode de “Shortcut Column”.



**Figura 12.7.7.4.** Pàgina principal del disseny de la columna de destil·lació CD-601 pel mètode de “Shortcut Column”.

A la figura 12.7.7.5 es presenten les condicions imposades en el Hysys per obtenir la separació desitjada. S’imposa un valor de relació de reflux 1,2 vegades més gran que la mínima.



**Figura 12.7.7.6** Condicions imposades per al disseny del “Shortcut Column” en la columna CD-601.

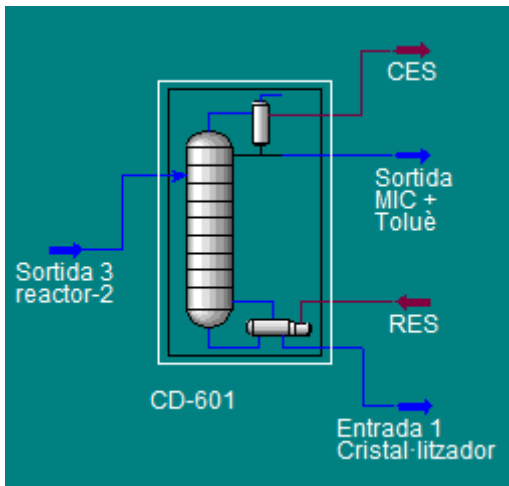
Una vegada imposades les condicions, s'obté el disseny de la columna amb el mètode de "Shorcut Column" amb els paràmetres presentats a la taula 12.7.7.4.

**Taula 12.7.7.4** Paràmetres de disseny obtinguts amb el mètode de "Shorcut column" per a la columna de destil·lació CD-601.

<b>Plats</b>	
Número mínim de plats	4,489
Número de plats	10,491
Plat de l'aliment	1,617
<b>Temperature</b>	
Condensador (°C)	52,01
Reboiler (°C)	116,1
<b>Cabals</b>	
Rectificació vapor (Kmols/h)	5,122
Rectificació líquid (kmols/h)	4,048
Stripping vapor (kmols/h)	5,122
Stripping líquid (kmols/h)	62,635
Calor condensador (KJ/h)	-169337,296
Calor reboiler (KJ/h)	445236,364

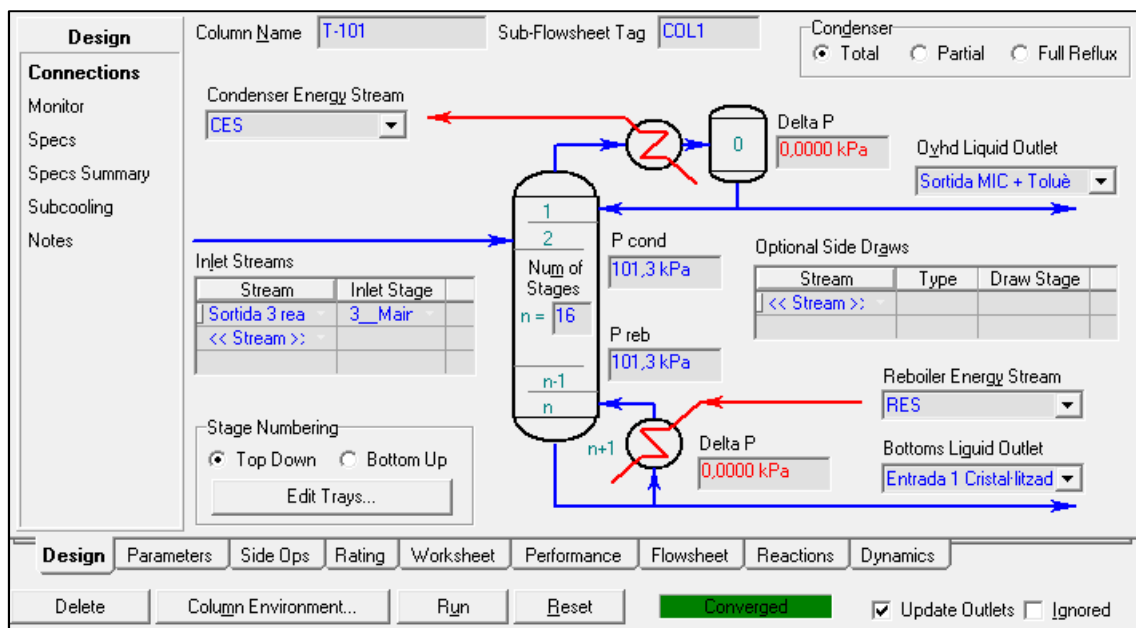
Un cop feta l'aproximació amb el mètode "ShortCut Column" es realitza el mètode rigorós "Distillation Column". Amb els paràmetres donats pel mètode aproximat el Hysys no és capaç de resoldre la columna i es fa necessari canviar alguns dels paràmetres del disseny, com són la relació de reflux i el número de plats. Per arribar a la separació desitjada es decideix augmentar la relació de reflux fins a 4. S'imposen 16 etapes, ja que és el valor teòric trobat i aquest és més restrictiu, com a etapa de l'aliment s'imposa l'etapa 3, ja que és un valor mig entre la teòrica i la del "Shortcut" amb el Hysys.

A la figures següents es presenta l'esquema general utilitzat en el Hysys per realitzar el disseny de la columna de destil·lació CD-601.



**Figura 12.7.7.7** Esquema general utilitzat en el Hysys pel disseny de la columna CD-601 pel mètode de “Distillation Column”

A la figura 12.7.7.8 es presenta la pantalla principal del disseny realitzat amb el Hysys amb el mètode “Distillation Column”.



**Figura 12.7.7.8.** Pàgina principal del disseny de la columna de destil·lació CD-601.

Si el disseny de la columna és correcte i el Hysys ha trobat una solució, s’observa una icona en verd on diu “Converged”. A les taules 12.7.7.5 i 12.7.6.6 es presenten les condicions de treball i les composicions dels corrents respectivament, per tant, el balanç de matèria a la columna CD-601.

**Taula 12.7.7.5** *Condicions de treball a la columna de destil·lació CD-401. Balanç de matèria.*

Corrent	Entrada	Sortida caps	Sortida cues
Fracció vapor	0,00	0,00	0,00
Temperatura (°C)	93,00	82,37	116,50
Pressió (Kpa)	101,30	101,30	101,30
Cabal molar (Kmol/h)	58,59	3,80	54,79
Cabal màssic (Kg/h)	6209,00	327,30	5881,00
Cabal de líquid (m3/h)	7,19	0,37	6,82
Entalpia molar (KJ/Kmol)	-31310,00	3751,00	-28850,00
Entropia molar	-5,02	-52,62	16,21
Flux de calor (KJ/h)	-1834000,00	14260,00	-1581000,00

**Taula 12.7.7.5** *Composicions dels cabals a la columna de destil·lació CD-601.*

Corrent	Entrada	Sortida caps	Sortida cues
MCC	0,0000	0,0000	0,0000
HCl	0,0000	0,0000	0,0000
MIC	0,0111	0,1711	0,0000
Toluè	0,8534	0,8289	0,8551
Fosgè	0,0000	0,0000	0,0000
1-naftol	0,0098	0,0000	0,0104
Carbaril	0,1257	0,0000	0,1344

S'obté una columna de 16 etapes d'equilibri, amb l'etapa de l'aliment a la 3. La relació de reflux s'ha hagut d'augmentar fins a 4 per obtenir la separació desitjada. Com s'observa amb una columna d'aquestes característiques s'aconsegueix la separació total de MIC, obtenint d'aquesta manera un destil·lat amb tot el MIC i una petita part del toluè que entra, i un residu amb toluè i la totalitat de 1-naftol i carbaril. Una vegada dissenyada la columna, el programa Hysys permet obtenir diferents gràfics, com temperatura, caudal i composició en funció del plat d'equilibri. Aquests es presenten als gràfics següents.

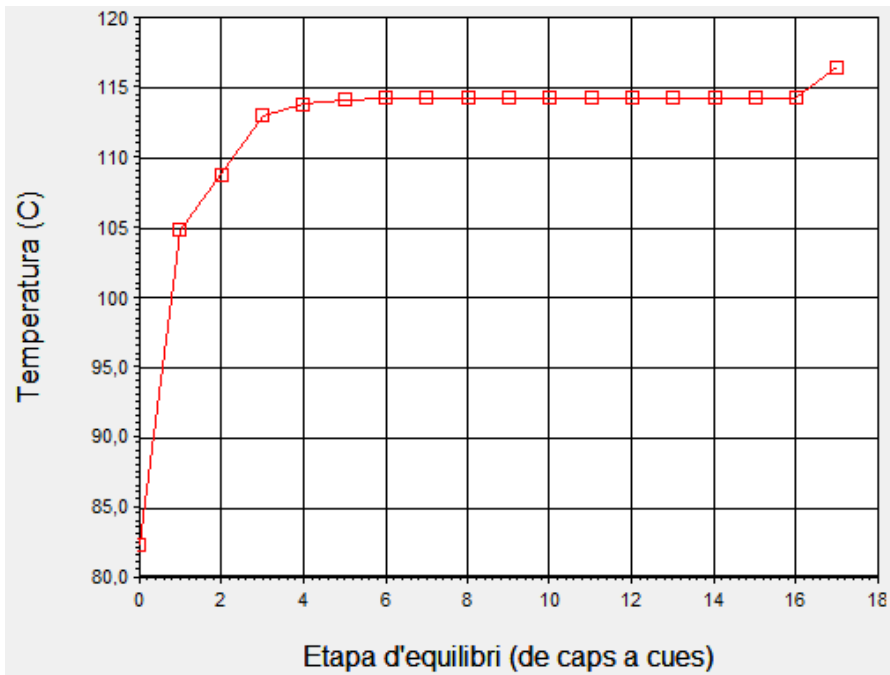


Figura 12.7.7.9 Temperatura en funció del número d'etapa d'equilibri a la columna de destil·lació CD-601

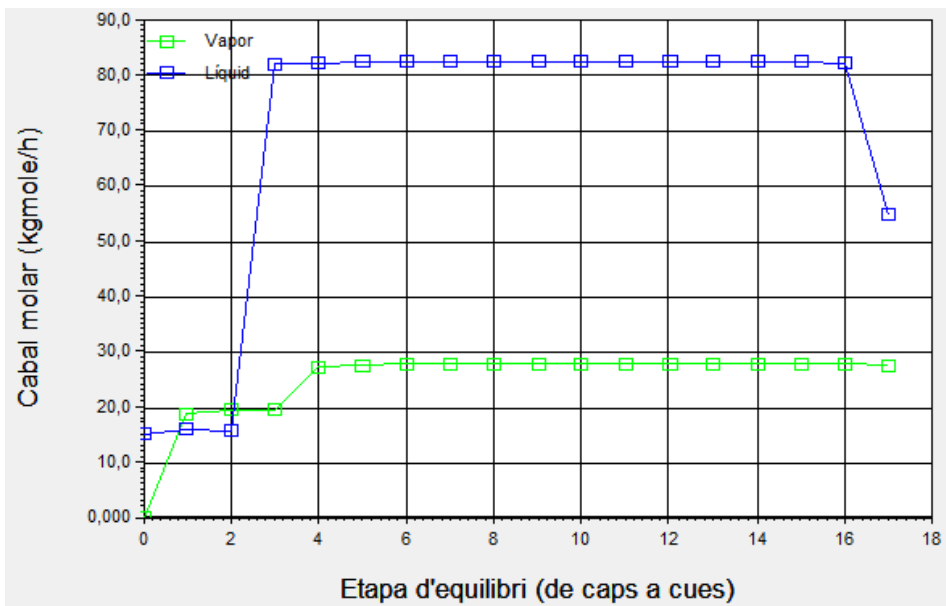
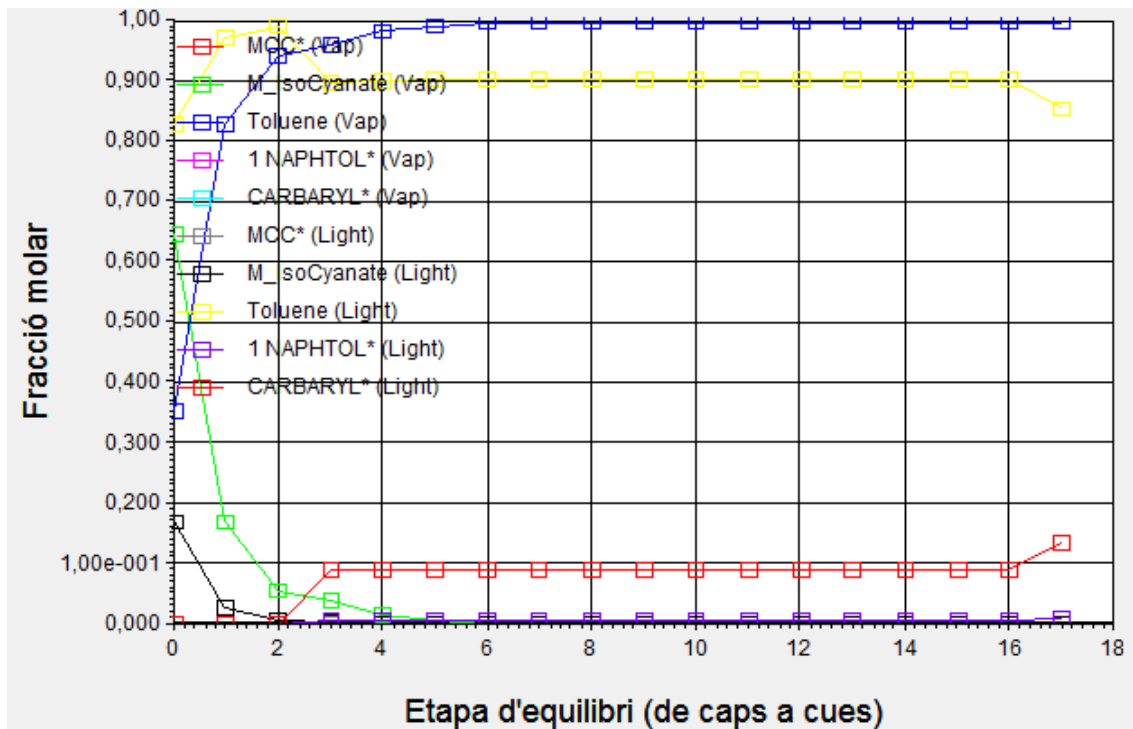


Figura 12.7.7.10 Cabal molar del vapor i del líquid en funció del número d'etapa d'equilibri a la columna de destil·lació CD-601.



**Figura 12.7.7.11** Composició dels diferents components en funció del número d'etapa d'equilibri a la columna de destil·lació CD-601.

Per tant, s'ha utilitzat el disseny definitiu amb el Hysys encara que utilitzant el valor de les etapes d'equilibri i etapa de l'aliment teòriques trobades, ja que eren més conservatives que el disseny amb el Hysys.

### 12.7.7.2 Dimensionat

Una vegada realitzats tots els càlculs es realitza el dimensionat de la columna. Per defecte, el mètode rigorós treballa amb un diàmetre de 1,5 metres. Com a espai entre plats ha calculat 0,55 metres, un número lògic en les columnes de rectificació. Per realitzar un dimensionat més acurat, el Hysys conté una aplicació anomenada "Tray Sizing".

Aquesta aplicació permet calcular el diàmetre i alçada de la columna tant si es fa de plats com si es fa de reblliment. En aquest cas, és preferible utilitzar la columna de reblliment, ja que el diàmetre calculat segons el "Tray sizing" és de 0,6096 metres.

A més, les columnes de reblliment són més barates i treballen millor amb fluids corrosius.



El Hysys permet escollir el tipus de rebliment i el material. Se sap que a mesura que el diàmetre del rebliment és més gran l'alçada de la columna augmenta. El material més adequat per la columna i el rebliment és el HASTELLOY® alloy B-2, ja que permet treballar amb compostos corrosius, com en el cas de la columna CD-601. Com que el Hysys no conté aquest compost a la seva base de dades, s'agafa rebliment de metall.

Es decideix utilitzar Pall Rings i s'escull la seva mida segons la taula 12.7.7.6.

**Taula 12.7.7.6** Mida del rebliment segons el diàmetre de la columna.

Mida del rebliment (polzades)	Diàmetre de la columna (m)
1/2" - 5/8"	0,1524 - 0,3048
5/8" - 1"	0,3048 - 0,4572
1" - 1 1/2"	0,4572 - 0,6096
1 1/2" - 2"	0,6096 - 1,2192
2" - 3"	>1,2192

Es decideix utilitzar Pall Rings d'un diàmetre de polzada distribuït de manera aleatòria.

A la figura 12.7.7.12 es presenta el rebliment utilitzat en la columna CD-601.



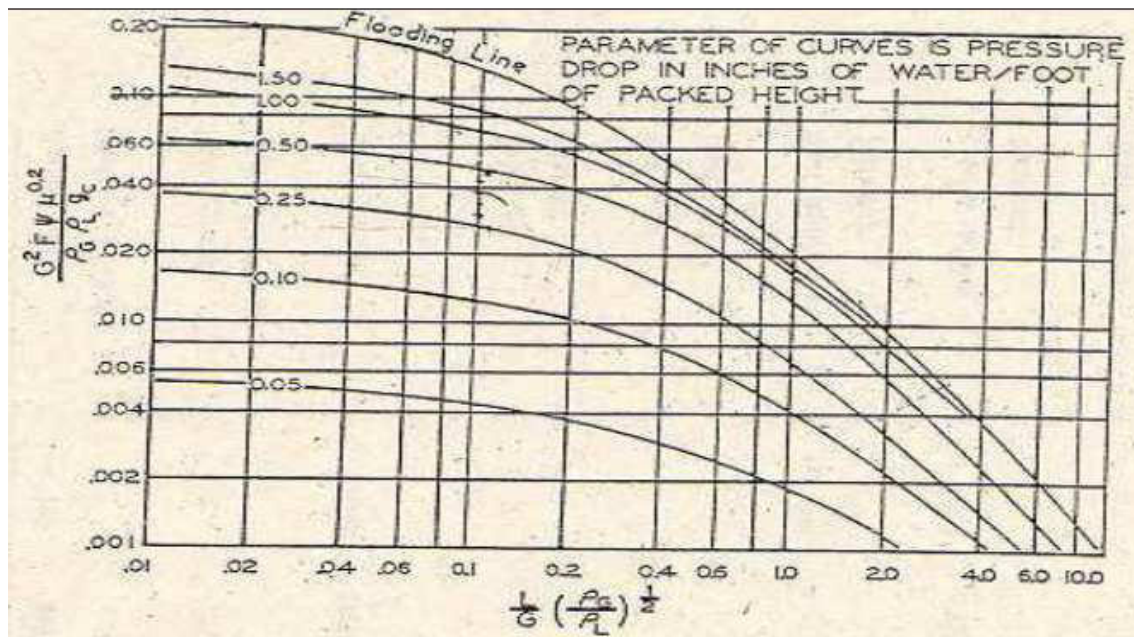
**Figura 12.7.7.12** Rebliment utilitzat en la columna CD-601. Pall Ring.

A la taula 12.7.7.7 es presenten els paràmetres del disseny del Hysys per la columna CD-601.

**Taula 12.7.7.7.** Paràmetres de disseny del Hysys del dimensionat de la columna CD-601.

Elements interns de la columna	
Tipus de rebliment	Pall Rings de metall (1 <sup>1/2</sup> polzades)
Correlació inundació	SLEv73
Correlació HETP	Norton
Número de peces de rebliment	32677,00
Pes del rebliment (Kg)	1043,10
Estimació del cost del rebliment (\$)	1146,20
Geometria de la columna	
Diàmetre (m)	0,6096
Àrea transversal (m <sup>2</sup> )	0,29
Alçada del rebliment (m)	8,612
Resultats hidràulics	
Inundació màxima (%)	57,30
Pèrdua de càrrega (Kpa)	1,72
Pèrdua de càrrega per metre de rebliment (Kpa/m)	0,20
Velocitat del gas (m <sup>3</sup> /h·m <sup>2</sup> )	5140,00
Velocitat del gas (m/s)	1,43

Per comprovar els resultats obtinguts amb el Hysys, es comprova el diàmetre de la columna obtingut mitjançant el mètode teòric que utilitza el gràfic d'Eckert, presentat a la figura 12.7.7.13.

**Figura 12.7.6.13.** Gràfic d'Eckert

Per poder trobar el diàmetre, primerament es troba el valor de l'eix de les abscisses, definit per l'equació 12.7.7.9.

$$\frac{L}{G} \cdot \left( \frac{\rho_G}{\rho_L} \right)^{1/2} \quad \text{Equació 12.7.7.9}$$

on,

L: cabal total de líquid (kmols/h)

G: cabal total de gas (kmols/h)

$\rho_G$ : densitat del gas (lb/ft<sup>3</sup>)

$\rho_L$ : densitat del líquid (lb/ft<sup>3</sup>)

Com que el cabals de líquid i de gas no són constants en la columna es calcula el diàmetre en dos parts de la columna, la part superior i la part inferior, utilitzant els cabals donats pel Hysys. A la taula 12.7.7.8 es presenten els paràmetres de l'equació 12.7.7.9 utilitzats per cada zona on es calcula el diàmetre.

**Taula 12.7.7.8.** Paràmetres de l'equació 12.7.7.9 utilitzats per cada zona on es calcula el diàmetre.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR
L (kmols/h)	15,998	82,516
G (kmols/h)	19,798	27,695
$\rho_G$ (lb/ft <sup>3</sup> )	0,186	0,186
$\rho_L$ (lb/ft <sup>3</sup> )	49,010	48,680

A la taula 12.7.7.9 es presenta el valor de les abscisses per les dues zones calculades amb els valors dels paràmetres de la taula 12.7.7.8.

**Taula 12.7.6.9.** Valor de les abscisses pel gràfic d'Eckert.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR
Valor abscisses (Eckert)	0,0497	0,1841

Considerant que la columna treballa a un 50% de la seva velocitat d'inundació s'arriba a una valor de l'eix d'ordenades, i mitjançant l'equació 12.7.7.10 es calcula el valor del cabal del gas en unitats de cabal dividides per l'àrea de pas, que permet obtenir aquesta última.

**Taula 12.7.6.10.** Valor de les ordenades pel gràfic d'Eckert.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR
Valor d'ordenades (Eckert)	0,0550	0,0430

Mitjançant l'equació 12.7.7.10 es pot calcular el valor de G per cada zona.

$$\frac{G^2 \cdot F \cdot \varphi \cdot \mu^{0,2}}{\rho_G \cdot \rho_L \cdot g_C} \quad \text{Equació 12.7.7.10}$$

on:

G: flux de gas (lb/s·ft<sup>2</sup>)

F: factor d'ompliment

$\varphi$  : relació entre la densitat de l'aigua i la del líquid

$\mu$ : viscositat del líquid (cP)

$g_C$ : constant de gravetat (32lb·ft/lb<sub>f</sub>·s<sup>2</sup>)

Mitjançant l'equació 12.7.7.11 es pot calcular el valor de l'àrea de la columna, amb la que es pot obtenir el diàmetre per cada zona, com es presenta a la taula 12.7.7.11.

$$A = \frac{G \left( \frac{\text{lb}}{\text{s}} \right)}{G \left( \frac{\text{lb}}{\text{s} \cdot \text{ft}^2} \right)} \quad \text{Equació 12.7.7.11}$$

**Taula 12.7.7.11.** Paràmetres necessaris per al càlcul del diàmetre de la columna CD-701. Valor del diàmetre trobat per a les dues zones.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR
F	28,000	28,000
$\varphi$	1,274	1,282
$\mu$ (cP)	0,248	0,347
$\rho_G$ (lb/ft <sup>3</sup> )	0,186	0,186
$\rho_L$ (lb/ft <sup>3</sup> )	49,010	48,680
$g_C$ (lb·ft/lb <sub>f</sub> ·s <sup>2</sup> )	32,000	32,000
G (lb/s·ft <sup>2</sup> )	0,770	0,655
G (lb/hr)	3938	5626
A (ft <sup>2</sup> )	1,420	2,388
<b>D (m)</b>	<b>0,403</b>	<b>0,523</b>

Es compara el valor del diàmetre obtingut per les dues zones de manera teòrica i amb el Hysys a la taula 12.7.7.12. Com a valor final, s'agafa el del Hysys ja que és el diàmetre més gran i, per tant, el més conservatiu.

**Taula 12.7.7.12.** *Valors del diàmetre de la columna CD-601 obtinguts per les dues zones pel mètode teòric i amb el Hysys.*

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR	HYSYS
D (m)	<b>0,403</b>	<b>0,523</b>	<b>0,6096</b>

La columna de destil·lació CD-601 s'ha dissenyat a través del programa Hysys, que utilitza dades teòriques que té a la seva base de dades. A l'hora de construir la columna, és aconsellable treballar amb un marge de seguretat, consistent en realitzar un sobredimensionat de la columna, per tal d'obtenir la separació desitjada en cas que el seu comportament fos diferent al teòric. L'eficiència de separació està directament relacionada amb l'alçada de rebliment a la columna, per tant el sobredimensionament ve donat per una augment en l'alçada en el rebliment. Pel cas de les columnes, es decideix sobredimensionar en un 25% sobre l'alçada de rebliment, tal com s'indica a continuació.

$$h \text{ rebliment} = h \text{ rebliment Hysys} \cdot 1,25 = 8,612 \text{ m} \cdot 1,25 = \mathbf{10,765 \text{ m}}$$

S'ha de tenir en compte que al augmentar l'alçada de rebliment, la pèrdua de càrrega serà més gran. El Hysys dona la pèrdua de càrrega en funció de l'alçada, per tant es pot realitzar el càlcul considerant l'alçada sobredimensionada.

$$0,20 \text{ KPa/m} \cdot 10,765 \text{ m} = \mathbf{2,153 \text{ KPa}}$$

Altra paràmetre que varia és el nombre de peces i el pes d'aquestes. Per poder adaptar-ho a l'alçada sobredimensionada s'utilitza l'alçada antiga, juntament amb el pes i el nombre de peces donades pel Hysys, tal com s'indica a continuació.

$$32677 \text{ peces} \cdot \frac{10,765 \text{ m}}{8,612 \text{ m}} = \mathbf{40846 \text{ peces}}$$

$$1043,1 \text{ Kg peces} \cdot \frac{10,765 \text{ m}}{8,612 \text{ m}} = \mathbf{1304 \text{ Kg peces}}$$

### 12.7.7.3 Disseny mecànic

L'alçada de la columna de destil·lació no només ve donada per l'alçada necessària de rebliment, sinó que s'han de tenir en compte altres factors com l'espai superior i inferior necessari o el suport per al rebliment. A més, es divideix el rebliment en dos zones separades per un redistribuïdor, que permet millorar el funcionament de la torre. La divisió en dos zones també evita la compactació i la formació de camins preferencials.

La divisió es realitza de manera que s'obtenen dues zones dividides per l'aliment, per tant, es calcula l'alçada superior i inferior calculant l'alçada de rebliment corresponent a cada plat i multiplicant-la per la quantitat de plats que hi ha en cada zona. S'obté una alçada superior de 2,018 metres i una alçada inferior de 8,747 metres.

A continuació es detallen els diferents elements que contindrà la columna al seu interior que no s'han tingut en compte en el disseny amb el Hysys, per fer-ho s'utilitza la guia donada per la casa "*Saint-Gobain Norpro*":

- **Distribuïdor de líquid**, s'utilitza el mateix que en la columna d'absorció AB-301, ja que segons la casa "*Saint-Gobain Norpro*" és vàlid per al diàmetre de treball de la columna CD-601. A l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, es troba l'explicació detallada d'aquest distribuïdor.
- **Redistribuïdor de líquid**, s'utilitza el mateix que en la columna d'absorció AB-301, ja que segons la casa "*Saint-Gobain Norpro*" és vàlid per al diàmetre de treball de la columna CD-601. A l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, es troba l'explicació detallada d'aquest redistribuïdor.
- **Reixetes de suport**, s'utilitzen els mateixos que en la columna d'absorció AB-302, ja que segons la casa "*Saint-Gobain Norpro*" són vàlids per al diàmetre de treball de la columna CD-601. A l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, es troba l'explicació detallada de les reixetes de suport.
- **Limitadors de rebliment**, com en el cas de l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, s'ha de comprovar la necessitat de posar

limitadors en la columna CD-601, utilitzant la taula presentada de l'apartat 11.4.6.1.3 tal com indica la casa "Saint-Gobain Norpro".

La variació de pressió en la columna és de 0,243 in. WC/ft i la densitat del rebliment de 25,726 lbs/ft<sup>3</sup>, per tant, no és necessari utilitzar limitadors de rebliment en la columna.

- **Boques d'home**, s'utilitzen les mateixes boques d'home pel que fa al model, quantitat i posició que en la columna d'absorció AB-301. A l'apartat 11.4.6.1.3 corresponent a la columna d'absorció AB-301, es troba l'explicació detallada de les boques d'home utilitzades.

Cal tenir en compte l'espai necessari que s'ha de deixar en la part inferior de la columna, s'utilitzen els mateixos espais que en el cas de la columna d'absorció AB-301, detallats a l'apartat 11.4.5.1.3.

Per tant, es pot calcular l'alçada total del cos de la columna, tal com s'indica a continuació:

$$\begin{aligned}
 h_{cos} &= h_{\text{espai superior}} + h_{\text{distribuidor}} + h_{\text{espai dist-rebl}} + \\
 &h_{\text{rebliment superior}} + h_{\text{suport}} + h_{\text{espai intermedi}} + h_{\text{redistribuidor}} \\
 &+ h_{\text{espai dist-rebl}} + h_{\text{rebliment inferior}} + h_{\text{suport}} + h_{\text{espai inferior}} = \\
 &= 1000 \text{ mm} + 450 \text{ mm} + 750 \text{ mm} + 2018 \text{ mm} + 114 \text{ mm} + 1000 \text{ mm} + \\
 &+ 450 \text{ mm} + 750 \text{ mm} + 8747 \text{ mm} + 114 \text{ mm} + 2000 \text{ mm} = 17393 \text{ mm}
 \end{aligned}$$

Per tal d'abaratir costos es decideix fer la columna de 18 metres, ja que serà més fàcil i econòmic trobar un proveïdor que vengui la xapa d'aquesta longitud i no de 17,393 m. La longitud que falta s'afegeix a la dels espais buits superior per sobre del distribuïdor, intermedi per sobre del distribuïdor i inferior sota del limitador, ja que això no afectarà al funcionament de la columna. S'obté un espai de 1202 mm pel superior i intermedi i 2203 mm per l'inferior.

A continuació es dissenya la columna de destil·lació CD-601 mitjançant el codi ASME, es realitza el càlcul per a la carcassa cilíndrica i per als fons toricsfèrics.

### Pressió de disseny

La pressió de disseny per a la es calcula aplicant la norma següent:

$$Pressió\ de\ disseny = \max(1,1 \cdot P.\ operació, P.\ operació + 2atm)$$

$$Pressió\ de\ disseny = \max(1,1atm, 3atm) = 3atm$$

Per tant, sabent que la pressió d'operació és 1 atmosfera (disseny funcional amb el Hysys) es pot calcular la pressió de disseny.

Pressió operació = 1atm.

Pressió de disseny = **3atm**.

### Temperatura de disseny

En aquest cas, la temperatura de disseny be donada pel disseny funcional (Hysys). A continuació es presenten les temperatures d'operació per caps i cues de la columna:

Temperatura d'operació caps = 82,37 °C

Temperatura d'operació cues = 116,50 °C

La temperatura de disseny be donada:

$$Temperatura\ de\ disseny = \max(80^{\circ}C, T.\ operació, +15^{\circ}C)$$

Temperatura de disseny caps = **97,37°C**

Temperatura de disseny cues = **131,50°C**

### Material

Per decidir quin és el millor material per la columna CD-601 cal tenir en compte que es treballa amb HCl i la corrosió que aquest compost produeix és elevada, consultant la taula de la figura 12.7.7.14 s'escull **HASTELLOY® alloy B-2** amb una corrosió menor de 0,508mm/any.



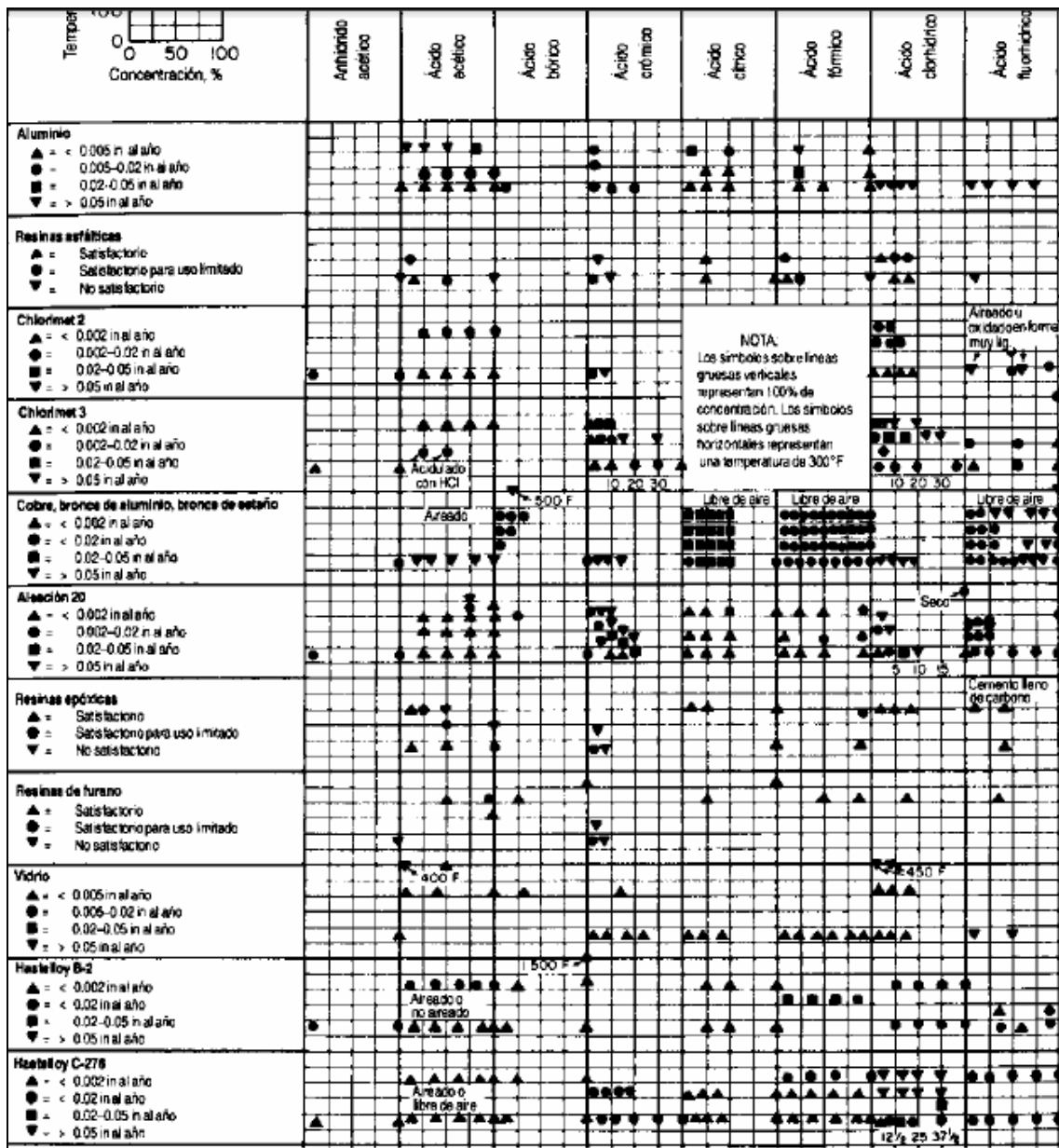


Figura 12.7.7.14 Dades detallades de corrosió en materials de construcció [Perrys Handbook]

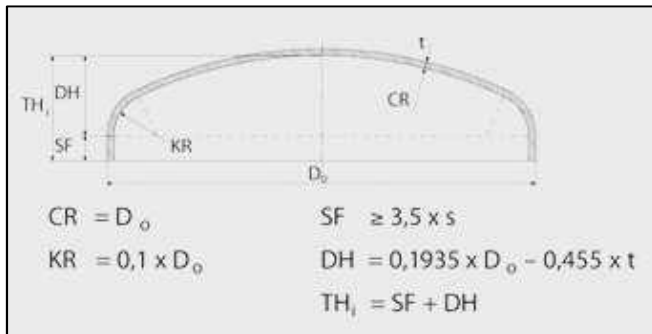
**Esponsor del fondo i el capçal. Càlcul a pressió interna**

Els tipus de fonsos i capçals més utilitzats són el toriesfèric, l'hemisfèric i l'el·lipsoidal, la seva elecció depèn de les condicions d'operació i el cost econòmic, en aquest cas s'utilitza el toriesfèric.

S'hauria de realitzar el càlcul del fondo i el capçal de manera independent, ja que treballen a temperatures de disseny diferents. Com que la única diferencia ve donada per la tensió admissible del material que varia amb la temperatura, es decideix

dissenyar per la temperatura més desfavorable, que s'obté en les cues de la columna (temperatura més alta). Per tant, només fa falta realitzar el disseny d'un fondo, que serà exactament igual a l'altre.

Aquest fons ve definit pel radi de la corona (L) i el radi del colze (r) que es calculen respecte al diàmetre del cos donat pel Hysys, tal com indica la casa "Koenig-co" en la figura 12.7.7.15, extreta de la seva pàgina web.



**Figura 12.7.7.15.** Esquema del fons torisfèric per tal de determinar l'alçada del fons de la columna de destil·lació CD-601.  $s=t$ .

Per tant,

$$L = D = 609,6 \text{ mm} = 609,6 \text{ mm}$$

$$r = 0,1 \cdot D = 0,1 \cdot 609,6 \text{ mm} = 60,96 \text{ mm}$$

$$\frac{L}{r} = 10$$

Per una relació  $L/r$  menor de  $16^{2/3}$  l'espessor es calcula amb l'equació 12.7.7.12.

$$t = \frac{P \cdot L \cdot M}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad \text{Equació 12.7.7.12}$$

on:

t = espessor del fondo (mm)

P = pressió de disseny del recipient (bar) = 3

M = factor que depèn de la relació  $L/r$ , en aquest cas igual a 1,54

E = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)

S = càrrega admissible del material (bar) = 7583,4 bar

L = radi de la corona (mm) = 609,6

El sobre espessor per corrosió del material és de 0,508mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobreesspessor serà 7,62 mm.

$C_1$  = marge per corrosió (mm) = 7,62 mm

$C_2$  = tolerància de fabricació (mm) = 10% de l'espessor

El resultat és de 8,62 mm, però donat que els espessors estàndards de xapa a Europa són: 3, 4, 5, 6, 8, 10, 12, 15, 20..., s'agafa un espessor dels fondos de 10 mm.

***espessor del fondo i el capçal = 10mm***

### **Espessor del cos de la columna. Càlcul a pressió interna**

L'equació 12.7.7.13 permet trobar l'espessor del cos de la columna.

$$t_1 = \frac{P \cdot R_{int}}{S \cdot E - 0,6 \cdot P} + C \cdot A \quad \text{Equació 12.7.7.13}$$

on:

$t_1$  = espessor del cos (mm)

$P$  = pressió de disseny del recipient (bar) = 3

$R_{int}$  = radi intern de la columna (mm) = 304,8

$E$  = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)

$S$  = càrrega admissible del material (bar) = 7583,4 bar

$C \cdot A$  = sobreesspessor (mm)

La tolerància de fabricació pel cas d'un cilindre és nul·la i el sobre espessor per corrosió del material és de 0,508mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobreesspessor serà 7,62 mm.

El resultat és de 7,762 mm, però donat que els espessors estàndards de xapa a Europa són: 3, 4, 5, 6, 8, 10, 12, 15, 20..., s'agafa un espessor del cos de 8 mm.

***espessor dels cos de la columna = 8 mm***

**Alçada dels fondo i el capçal**

Una vegada determinats els espessors del cos i els fondo i capçal es pot determinar l'alçada del fondo i el capçal per determinar l'alçada total de l'equip, tal com indica la casa "Koenig-co" en la figura 12.7.7.15, extreta de la seva pàgina web..

$$DH = 0,1935 \cdot D_o - 0,455 \cdot t \quad \text{Equació 12.7.7.14}$$

$$SF = 3,5 \cdot s \quad \text{Equació 12.7.7.15}$$

$$TH = SF + DH \quad \text{Equació 12.7.7.16}$$

Es calcula l'alçada del fons toriesfèric sense tenir en compte l'espessor de la xapa, tal com s'indica a continuació:

$$DH = 0,1935 \cdot 609,6 \text{ mm} - 0,455 \cdot 10 \text{ mm} = 113,41 \text{ mm}$$

$$SF = 3,5 \cdot 10 \text{ mm} = 35 \text{ mm}$$

$$TH = 35 \text{ mm} + 113,41 \text{ mm} = 148,41 \text{ mm}$$

Per tant, l'alçada de la columna sense l'espessor és de **18297 mm**.

**12.7.7.4 Pes de la columna****Pes de la columna buida**

Es calcula el volum del fondo i el capçal de la columna mitjançant l'equació 12.7.7.17.

$$Vi = 0,1 \cdot (D_{col \text{ superior}})^3 \quad \text{Equació 12.7.7.17}$$

Per tant,

$$Vi = 0,1 \cdot (609,6 \text{ mm})^3 = 0,0227 \text{ m}^3$$

Com que es tenen un fondo i un capçal el volum és de 0,0454 m<sup>3</sup>.

Per calcular el pes dels capçals, es calcula el volum extern del fondo i el capçal, mitjançant l'equació 12.7.7.18.

$$Ve = 0,1 \cdot ((D_{col} + 2 \cdot t)^3) \quad \text{Equació 12.7.7.18}$$

Per tant,

$$Ve = 0,1 \cdot (609,6 \text{ mm} + 2 \cdot 10 \text{ mm})^3 = 0,0250 \text{ m}^3$$

Com que es tenen dos capçals el volum és de 0,0500 m<sup>3</sup>.

Per tant, la resta correspon al volum de la paret dels capçals:

$$V_{paret} = 0,0500 \text{ m}^3 - 0,0454 \text{ m}^3 = 0,0046 \text{ m}^3$$

Es calcula el volum intern i extern del cos de la columna, per tal de determinar el volum de paret.

$$V_i = \pi \cdot \left(\frac{D_{col}}{2}\right)^2 \cdot h = \pi \cdot \left(\frac{609,6 \text{ mm}}{2}\right)^2 \cdot 18000 \text{ mm} = 5,254 \text{ m}^3$$

$$V_e = \pi \cdot \left(\frac{D_{col} + 2 \cdot t}{2}\right)^2 \cdot h = \pi \cdot \left(\frac{609,6 \text{ mm} + 2 \cdot 8 \text{ mm}}{2}\right)^2 \cdot 18000 \text{ mm} \\ = 5,533 \text{ m}^3$$

$$V_{paret} = 5,533 \text{ m}^3 - 5,254 \text{ m}^3 = 0,279 \text{ m}^3$$

Per tant, el volum total de la paret de la columna és de  $0,2836 \text{ m}^3$ .

Sabent que la densitat del Hastelloy B2 és de  $9220 \text{ Kg/m}^3$ , es pot calcular el pes de la columna buida, tal com s'indica a continuació:

$$0,2836 \text{ m}^3 \cdot \frac{9220 \text{ Kg}}{1 \text{ m}^3} = 2615 \text{ Kg}$$

Es considera que el pes dels elements interns és del 10 % del total del pes de l'equip buit, tal com s'indica a continuació.

$$Pes \text{ elements interns} = 0,1 \cdot 2615 \text{ Kg} = 261,5 \text{ Kg}$$

El pes del reblliment ve donat pel Hysys i és de 1304 Kg, per tant es calcula el pes total de la columna buida:

$$Pes \text{ buit} = 2615 \text{ Kg} + 261,5 \text{ Kg} + 1304 \text{ Kg} = \mathbf{4181 \text{ Kg}}$$

### **Pes de la columna plena d'aigua**

Es calcula el volum de la columna sumant el volums dels capçals i el cos:

$$V_{col} = 0,0454 \text{ m}^3 + 5,254 \text{ m}^3 = 5,2994 \text{ m}^3$$

Per tant, amb la densitat de l'aigua a la temperatura de  $25^\circ\text{C}$  i el pes de la columna buida es pot calcular el pes de la columna amb aigua:

$$Pes_{col \text{ aigua}} = 4181 \text{ Kg} + 5,2994 \text{ m}^3 \cdot \frac{997,13 \text{ Kg}}{1 \text{ m}^3} = \mathbf{9465 \text{ Kg}}$$

**Pes de la columna en operació**

A partir de la densitat mitjana del fluid d'operació es calcula el pes de la columna en operació:

$$Pes_{col\ operació} = 4181\text{ Kg} + 5,2994\text{ m}^3 \cdot \frac{392,688\text{ Kg}}{1\text{ m}^3} = 6262\text{ Kg}$$

**12.7.7.5 Aïllament**

Degut a que la temperatura d'operació de l'equip és superior a 60°C cal aïllar l'equip amb llana de vidre. A més, al capçal es tenen temperatures molt baixes, per tant també s'ha d'aïllar. Es realitza el càlcul pel capçal i pel fondo de manera independent amb l'equació 12.7.7.19.

$$X = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{\Delta T}{D_{ext}}\right)^{\frac{1}{4}}} \quad \text{Equació 12.7.7.19}$$

on:

X = espessor de l'aïllant (cm)

$\Delta T$  = diferència de temperatura entre l'interior i l'exterior del recipient

$D_{ext}$  = diàmetre exterior del recipient (m)

**Taula 12.7.7.13** resultats obtinguts pel disseny a la part superior i inferior.

	PART SUPERIOR	PART INFERIOR
T disseny (°C)	97,37	131,5
$\Delta T$ (°C)	82,37	116,5
X (cm)	2,46	2,26

S'utilitza en els dos cassos el més desfavorable i es decideix augmentar el valor obtingut pel doble per assegurar un bon aïllament.

$$X = 2,46\text{ cm} \times 2 = 4,92\text{ cm}$$

Pel que fa al cos de la columna, s'aïllarà amb el més desfavorable, és a dir, 4,92 cm.

Aquest aïllant quedarà recobert per una capa d'alumini per tal de protegir-lo de les inclemències meteorològiques.

Es calcula el volum de l'aïllant calculant el volum als fondos i al cos, els resultats es presenten a la taula 12.7.7.14.

**Taula 12.7.7.14** Càlcul del volum d'aïllant necessari en la columna CD-601

Volum aïllant capçal (m <sup>3</sup> )	0,0135
Volum aïllant fondo (m <sup>3</sup> )	0,0135
Volum aïllant cos (m <sup>3</sup> )	1,8611
<b>Volum aïllant total (m<sup>3</sup>)</b>	<b>1,8881</b>

## 12.8 DISSENY DELS INTERCANVIADORS DE CALOR

### 12.8.1 introducció

Un bescanviador de calor és un dispositiu dissenyat per transferir calor entre dos fluids, que poden estar separats per una barrera o trobar-se en contacte. Degut a la importància de transferir calor entre fluids en qualsevol planta química, és un dels processos més freqüents i important a l'enginyeria.

### TIPUS D'INTERCANVIADORS DE CALOR

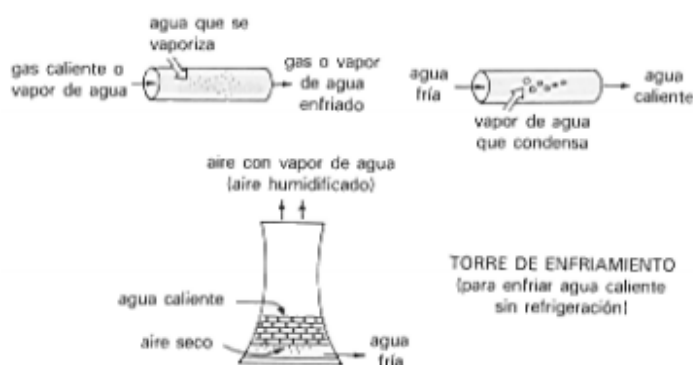
Els intercanviadors es poden dividir en dos grups segons el tipus de contacte entre els fluids que intercanvien la calor, intercanviadors de contacte directe i contacte indirecte.

### INTERCANVIADORS DE CONTACTE DIRECTE

En els intercanviadors de contacte directe els dos corrents es barregen entre ells i la corrent més calenta cedeix directament la seva calor a la corrent freda. Per poder utilitzar aquests bescanviadors, és necessari que els fluids no reaccionin entre ells. Existeixen dos tipus de bescanviadors de contacte directe segons la naturalesa de les substàncies que hi intervenen:

- Intercanviadors gas-sòlid.
- Intercanviadors fluid-fluid

En els intercanviadors fluid-fluid, els fluids en contacte poden ser immiscibles o miscibles com en el cas de l'aigua i l'aire, on la fase aquosa s'evapora en l'aire. Les torres de refrigeració són un exemple d'aquest tipus d'intercanviadors.





**Figura 12.8.1.1.** Esquema de l'intercanviador de calor fluid-fluid miscibles.

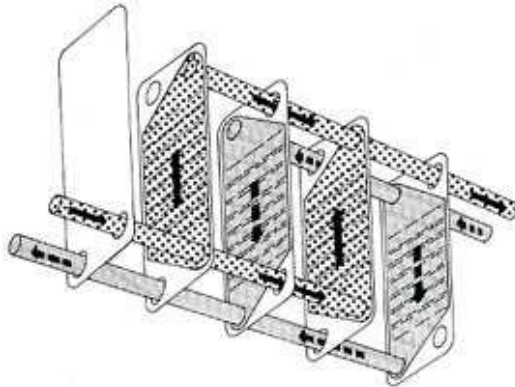
### INTERCANVIADORS DE CONTACTE INDIRECTE

Els intercanviadors de contacte indirecte són aquells on els fluids no es troben en contacte directe.

- Bescanviadors de plaques paral·leles: aquest tipus de bescanviadors són molt utilitzats per facilitat de manteniment i neteja que suposen, tot i així, tenen limitacions en les condicions de pressió i temperatura de treball. Existeixen dos tipus de bescanviadors de plaques:

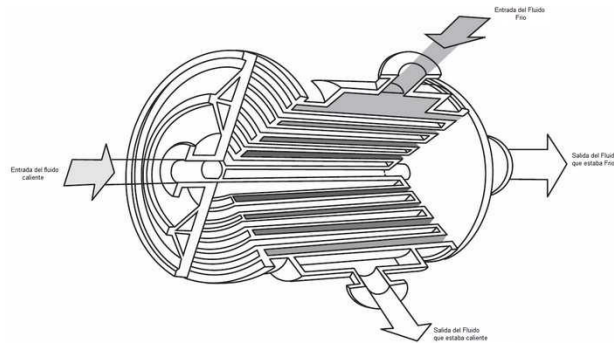
- ❖ Bescanviadors de plaques planes: consisteixen en un conjunt de plaques rectes acoblades unes a les altres. Les plaques tenen uns canals estampats que augmenten la turbulència del fluid i afavoreixen la transmissió de calor, sent els bescanviadors amb coeficients de bescanvi més elevats. La circulació dels fluids té lloc en contracorrent entre placa i placa alternadament fluid fred i calent.

A la figura 12.8.1.2 es mostra un esquema d'aquest bescanviador.



**Figura 12.8.1.2** Bescanviador de plaques planes.

- ❖ Bescanviadors de plaques en espiral: consistent en dues plaques enrotllades, on el fluid calent circula des de el centre fins a la perifèria.



**Figura 12.8.13.** Bescanviador de plaques planes.

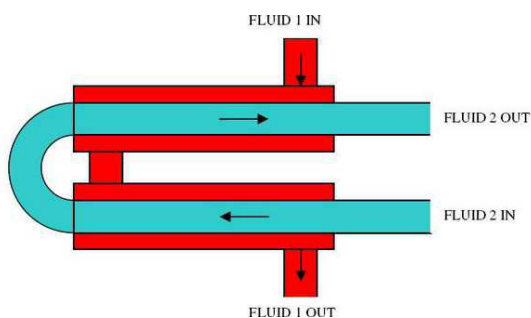
- **Bescanviadors amb aletes:** aquests tipus de bescanviador utilitzen superfícies amb aletes amb l'objectiu d'augmentar la superfície de transferència de calor. Al mercat es poden trobar:

- ❖ Tubs amb aletes.
- ❖ Plaques amb aletes.
- ❖ Aerorefrigerants.

En aquests últims, el fluid de refredament és l'aire. Els tubs tenen aletes i es col·loquen formant un feix on l'aire circula entre els tubs per impulsió (circulació forçada) o aspiració (circulació induïda).

- **Bescanviadors de tub únic:** aquests s'utilitzen en els casos en que la superfície de bescanvi de calor requerida no és massa elevada. Existeixen dos tipus de bescanviadors de tub únic:

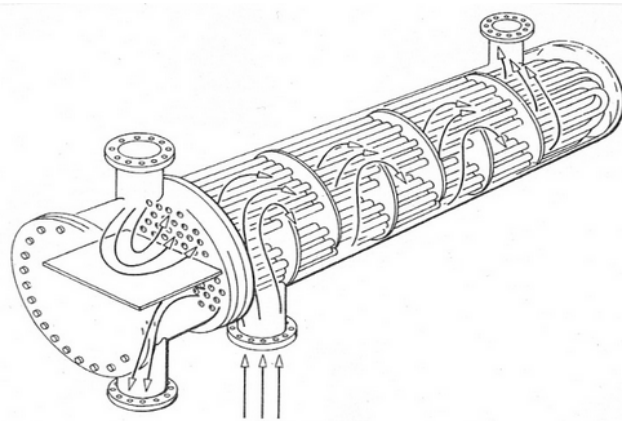
- ❖ Bescanviadors de doble tub: consisteixen en dos tubs concèntrics, un dels dos fluids circula pel tub l'interior i l'altre per l'espai anular. Un esquema d'aquest tipus de bescanviador es mostra a la figura 12.8.1.4



**Figura 12.8.1.4** Bescanviador de doble tub.

- ❖ Refredador de trombó: en aquest cas es tenen diferents tubs simples en U per on circula el fluid que es vol refredar i el fluid refrigerant cau des de la part superior del sistema.
- Bescanviadors multitubulars: aquests tipus de bescanviadors són segurament els més estesos i utilitzats en la indústria química ja que permeten disposar de grans àrees de bescanvi en un espai reduït. Existeixen dos tipus principals de bescanviadors multitubulars:
  - ❖ Bescanviador de carcassa i tubs: estan formats per una gran carcassa on s'acomoda un feix de tubs. Un dels fluids circula per l'interior dels tubs i l'altre per l'exterior.

El fluid que circula per tubs pot fer-ho en un sol pas (bescanviador simple) o en varis passos (bescanviador de pas múltiple). L'optimització d'aquests equips es basa en variar el nombre de tubs, el seu diàmetre i la seva longitud amb la restricció de la pèrdua de pressió. A la figura 12.8.1.5 es mostra l'esquema general d'aquests bescanviadors.



**Figura 12.8.1.5.** Bescanviador de carcassa i tubs.

- ❖ Bescanviador amb tubs en espiral: el concepte per aquest tipus de bescanviadors és el mateix que en el cas de carcassa i tubs amb la diferència de que els tubs es disposen en forma d'espiral dins la carcassa.

## 12.8.2 BESCANVIADORS DE CARCASSA I TUBS

### 12.8.2.1 Introducció

Els intercanviadors de calor de carcassa i tubs són els més comuns en els grans processos químics i són idonis per a les aplicacions a pressió i temperatures elevades. Tal i com ja s'ha explicat a la introducció, aquest tipus d'intercanviador consta d'una carcassa amb un feix de tubs en el seu interior, un fluid passa a través dels tubs i l'altre per fora (a través de la carcassa) per a transmetre la calor entre fluids.

Aquests equips consten de les parts següents:

- La carcassa
- Els capçals als dos extrems de la carcassa.
- Els tubs, que comuniquen els capçals entre ells
- Els deflectors, que creen turbulències i ajuden a suportar els tubs.

El fluid que circula pels tubs pot fer-ho en un sol pas (bescanviador simple) o en varis passos (bescanviador de pas múltiple, sempre en nombre parell). Variant el nombre de passos per tubs, el seu diàmetre i longitud es poden optimitzar els valors dels coeficients de transferència de calor tenint en compte que hi haurà una pèrdua de càrrega màxima que admetrà el procés.

Es poden distingir tres tipus de bescanviadors de carcassa i tubs:

- Placa tubular fixada: és el tipus més senzill i de menor cost econòmic però en contrapartida els tubs no es poden moure per fer-ne el manteniment i la neteja. NO són vàlids per a salts tèrmics majors de 80°C ni quan es produeixen expansions en la carcassa o els tubs.
- Tubs en U:el feix de tubs es troba disposat en forma de U i per tant només requereix una placa tubular en un dels extrems, dins dels tipus de capçal flotant és el més econòmic però cal que el fluid de procés estigui relativament net.
- Capçal flotant: són més versàtils que els anteriors ja que permeten expansions i fluids de procés bruts, el feix de tubs no està fixat i per tant es pot retirar per fer-ne la neteja de manera més còmode.

### 12.8.2.2 Disseny funcional i mecànic.

Per al disseny mecànic i funcional dels bescanviadors de calor de carcassa i tubs, s'ha utilitzat el programa *Aspen Exchanger Design & Rating V.7.3*.

Amb l'objectiu d'assegurar que el disseny fet amb el programa i el disseny proposat per el mètode de Kern són equivalents, el primer dels bescanviadors s'ha dissenyat de les dues maneres i un cop comprovat que els resultats són pràcticament els mateixos s'han dissenyat la resta d'equips amb el programa esmentat.

A continuació es detallen els passos del mètode de Kern.

#### 1) BALANÇ TÈRMIC

El primer pas és decidir quin fluid circula per tubs i quin per la carcassa, per fer-ho es poden seguir les recomanacions següents:

Fluids per carcassa:

- Cabals baixos.
- Fluids viscosos.

Fluids per tubs:

- fluid a més temperatura i pressió.
- Fluid més corrosiu i brut.

Un cop decidit el fluid que circula per carcassa i el que circula per tubs cal caracteritzar el sistema definint les temperatures d'entrada i sortida d'ambdós fluids.

- $T_1$  =temperatura d'entrada del fluid de procés.
- $T_2$ = temperatura de sortida del fluid de procés.
- $t_1$  = temperatura d'entrada del fluid refrigerant.
- $t_2$ = temperatura de sortida del fluid refrigerant.

Coneixen el cabal màssic del fluid de procés i les propietats físiques de cadascun d'ells es procedeix a fer el balanç d'energia:

$$q = M_s \cdot Cp_s \cdot (T_1 - T_2) = m_t \cdot Cp_t \cdot (t_2 - t_1) \quad \text{Equació 12.8.2.1}$$

on:

- subíndex (s) = shell, carcassa
- subíndex (t) = tubs
- M, m = cabals màssics (kg/s)
- Cp = capacitat calorífica (J/kg°C)
- q = calor bescanviat (W)

## 2) CÀLCUL DE DTML

El càlcul de DTML permetrà decidir si és millor que els fluids circulin en paral·lel o en contracorrent, de forma general la transmissió és millor en contracorrent i en la planta tots els bescanviadors dissenyats circulen en contracorrent.

$$DTML = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}}$$

$$\Delta T_1 = T^{\circ}\text{entrada fluid de tubs} - T^{\circ}\text{sortida fluid de carcassa}$$

$$\Delta T_2 = T^{\circ}\text{sortida fluid de tubs} - T^{\circ}\text{entrada fluid de carcassa}$$

Amb el càlcul de DTM fet el següent pas és decidir el nombre de passos per carcassa (ns) i el nombre de passos per tubs (nt).

El nombre de passos per tubs de forma general varia entre 1 i 16, en el cas de que hi hagi més d'un pas per carcassa, el nombre de passos per tubs serà el de carcassa multiplicat per dos.

Per a fer una primera iteració se suposa un sol pas per tubs i un sol pas per carcassa.

## 3) CORRECCIÓ DTML

F és una factor de correcció que s'avalua gràficament. És funció de número de passos per carcassa i per tubs i de les temperatures d'entrada i sortida del bescanviador. Per un sol pas per tubs i per carcassa no s'ha de realitzar la correcció.

$$(DTML)_c = DTML \cdot F \text{ Equació 12.8.2.2}$$

si  $F > 0,85$  cal corregir DTML

si  $F < 0,85$ , cal augmentar ns

F es pot conèixer amb els paràmetres adimensionals i la figura següents:

$$R = \frac{(T_1 - T_2)}{(t_2 - t_1)} \quad \text{Equació 12.8.2.3}$$

$$S = \frac{(t_2 - t_1)}{(T_1 - t_1)} \quad \text{Equació 12.8.2.4}$$

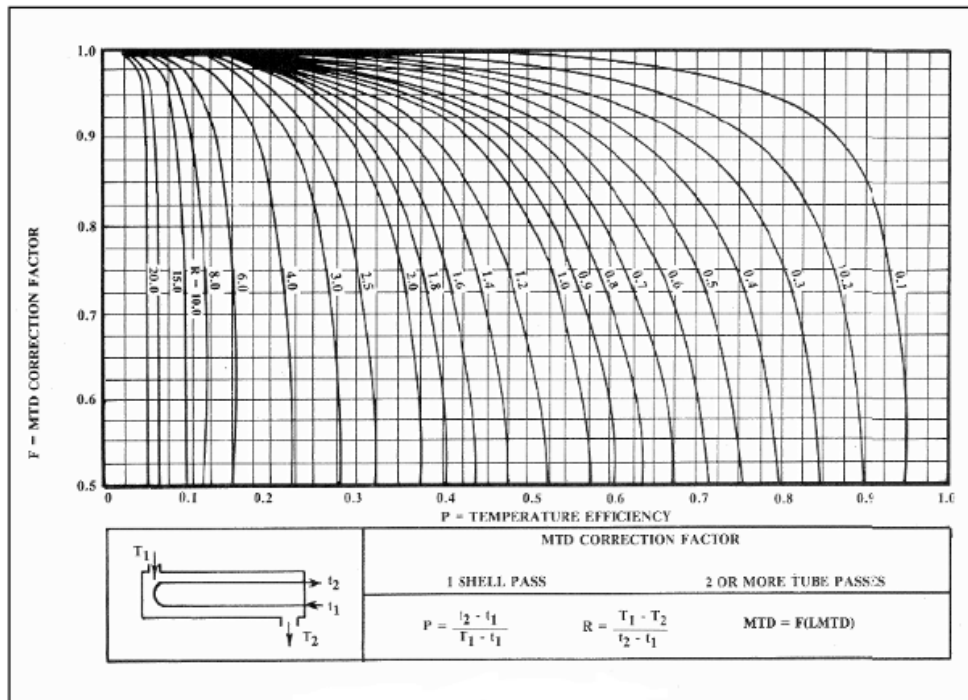


Figura 12.8.2.1 Determinació gràfica del factor de correcció F.

#### 4) SELECCIÓ DEL BESCOANVIADOR

El primer pas és escollir un valor del coeficient global de transferència de calor (U) tenint en compte les dades bibliogràfiques e funció del tipus de fluids que circulen per carcassa i per tubs.

Amb el valor de U determinat es pot calcular l'àrea total de bescanvi requerida:

$$\text{Àrea} = \frac{q}{U \cdot DTML} \quad \text{Equació 12.8.2.5}$$

En segon lloc es seleccionen les característiques dels tubs:

- L = longitud
- Di = diàmetre intern
- De = diàmetre extern
- $\Delta x$  = espessor

El diàmetre extern sol oscil·lar entre 16 i 50mm. Generalment s'utilitzen tubs de diàmetres petits degut a que l'equip sol ser més econòmic i compacte, encara que els tubs més amples són més fàcils de netejar per mètodes mecànics i s'utilitzaran per fluids que tinguin gran risc de produir incrustacions.

Caldrà tenir en compte que a la longitud total dels tubs s'hi resten 2,5cm per costat que corresponen a la unió dels tubs amb el capçal

El gruix dels tubs serà funció de la pressió interna i del factor de corrosió i es pot calcular amb la figura següent:

**Table 12.3. Standard dimensions for steel tubes**

Outside diameter (mm)	Wall thickness (mm)				
	1.2	1.6	2.0	2.6	3.2
16	1.2	1.6	2.0	—	—
20	—	1.6	2.0	2.6	—
25	—	1.6	2.0	2.6	3.2
30	—	1.6	2.0	2.6	3.2
38	—	—	2.0	2.6	3.2
50	—	—	2.0	2.6	3.2

**Figura 12.8.2.2** Dimensions estàndard per a tubs.

La longitud preferida de tubs oscil·la entre els 6 i els 16 peus (1,83 a 4,88 metres). Per una superfície donada, l'ús de tubs llarga reduirà el diàmetre de carcassa. Aquesta elecció generalment s'associa a un preu menor, particularment per pressions altes del costat de carcassa.

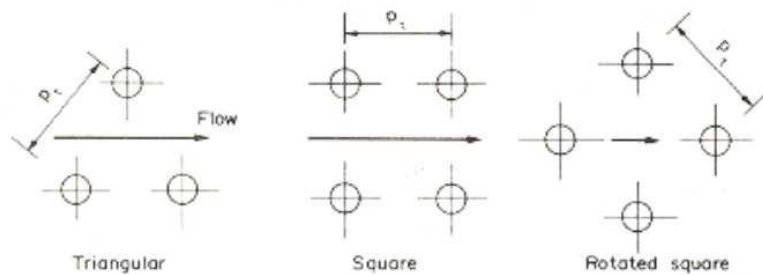
Per a començar els càlculs s'agafa un diàmetre extern de 19mm.

A continuació cal escollir quina és la distribució que segueixen els tubs. Es defineix pitch com la distància entre els centres de dos tubs consecutius. El pitch triangular i romboïdal proporcionen altes velocitats de transferència de calor, però en canvi la pèrdua de pressió és alta comparada amb el pitch quadrat. El pitch quadrat s'utilitza quan es necessita una neteja mecànica pel costat de carcassa.



El pitch recomanat és de 1,25 vegades el diàmetre extern del tub.

El valor mínim d'un pitch quadrat amb requeriments de neteja és de 6,4mm.



**Figura 12.8.2.3** Possibles distribucions de tubs.

A partir dels valors del diàmetre extern dels tubs ( $D_e$ ) i de la longitud ( $L$ ) suposats es pot calcular l'àrea de bescanvi d'un tub,  $A_t$ :

$$A_t = \pi \cdot D_e \cdot L \quad \text{Equació 12.8.2.6}$$

Amb l'àrea total de bescanvi necessària i l'àrea de bescanvi d'un tub es calcula en nombre de tubs,  $N_t$ :

$$N_t = \frac{\text{Àrea total}}{\text{Àrea d'un tub}} \quad \text{Equació 12.8.2.7}$$

Coneixent el nombre de tubs es passa a calcular el diàmetre de la carcassa. Els diàmetres típics solen oscil·lar entre 150mm i 1520mm.

Per calcular el diàmetre de carcassa s'ha de sumar el diàmetre del feix de tubs i l'espai entre el feix de tubs i la paret externa de la carcassa que dependrà bàsicament del tipus de carcassa utilitzada. Els tipus de carcassa corresponen als que s'especifiquen en la figura següent:

<b>Fixed and U-tube</b>	Tipo U/L/M/N
<b>Outside packed head</b>	Tipo P
<b>Split-ring floating head</b>	Tipo S/W
<b>Pull-trough floating head</b>	Tipo T

**Figura 12.8.2.4** Possibles tipus de carcassa.

El primer que cal conèixer és el diàmetre del feix de tubs del bescanviador:

$$D_b = D_{ext} \cdot \left(\frac{N_t}{K_1}\right)^{1/n_1}$$

on:

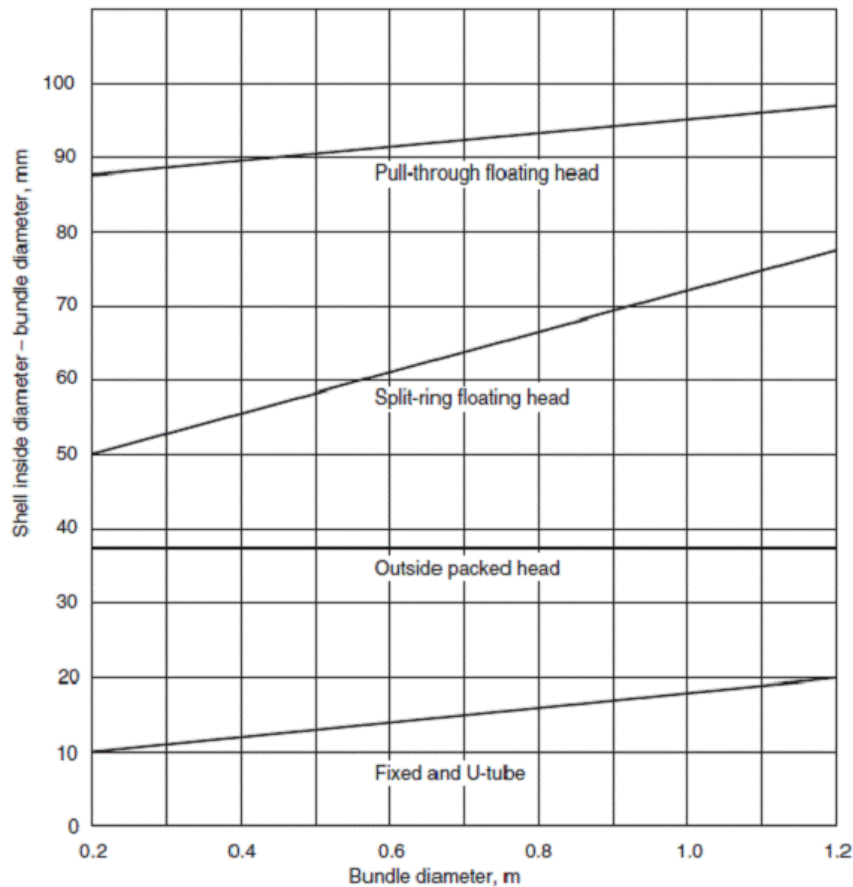
- $N_t$ = numero de tubs
- $D_b$ = diàmetre del feix de tubs (mm)
- $D_{ext}$ = diàmetre exterior dels tubs (mm)
- $N_1$  i  $K_1$  son funció del pitch escollit i del número de passos per tubs, en el cas dels bescanviadors dissenyats el pitch escollit ha estat sempre triangular:

**Taula 12.8.2.1** Valors de les constants  $K_1$  i  $n_1$  per pitch triangular.

PITCH TRIANGULAR					
Passos pel tub	1	2	4	6	8
$K_1$	0,319	0,249	0,175	0,0743	0,0365
$n_1$	2,142	2,207	2,285	2,499	2,675

L'espai entre la carcassa i el feix de tubs es pot trobar gràficament amb la figura 12.8.2.5 Cal situar el diàmetre del feix de tubs a l'eix x, a l'eix y es trobarà la diferència del diàmetre de carcassa i del diàmetre del feix de tubs ( $D_s - D_b$ ).

El diàmetre del feix de tubs és major per pitch quadrats que triangulars i en augmentar el numero de passos per tubs aquest també augmenta.



**Figura 12.8.2.5** Distància entre carcassa i feix de tubs.

El diàmetre de carcassa finalment es calcula com:

$$D_s = \text{valor de l'eix } y + D_b$$

Amb el valor del diàmetre de la carcassa conegut es comprova que el quocient entre la longitud dels tubs i el diàmetre de carcassa ( $L/D_s$ ) estigui comprès entre 4 i 6.

- Si  $L/D_s$  està entre 4 i 6 es continua amb el disseny.
- Si  $L/D_s$  és menor de 4 cal un valor de  $L$  major.
- Si  $L/D_s$  és major de 6 cal un valor de  $L$  menor.

El següent pas és la selecció del número de passos per tub ( $n_{pt}$ ) mitjançant velocitats típiques de circulació per tubs ( $v_t$ ).

$$v_t = \frac{m_t}{\rho_t \cdot A_{pas \ 1 \ tub} \cdot N_{tp}} \quad \text{Equació 12.8.2.8}$$

on:

- $m_t$  = cabal màssic del fluid que circula per tubs.
- $\rho_t$  = densitat del fluid que circula per tubs.
- $A_{pas\ 1\ tub}$  = àrea de pas del fluid per un sol tub. Es calcula com:

$$A_{pas\ 1\ tub} = \frac{\pi}{4} \cdot D_i^2 \quad \text{Equació 12.8.2.9}$$

- $N_{tp}$  = número de tubs per pas. Es calcula com:

$$N_{tp} = \frac{N_t}{n_{pt}} \quad \text{Equació 12.8.2.10}$$

on:

- $N_t$  = número total de tubs.
- $n_{pt}$  = número de passos per tub.

La velocitat que s'obté es compara amb els valors de velocitats típiques de la bibliografia:

- Líquid per tubs: entre 1 i 2 m/s, màxim 4m/s si es vol evitar l'embrutiment.
- Líquid per carcassa: entre 0,3 i 1 m/s.
- Vapors: depèn de la pressió d'operació i de la densitat del gas. Els valors més baixos corresponen als vapors de pes molecular més alt.
  - Buit: 50-70 m/s
  - Pressió atmosfèrica: 10-30 m/s
  - Alta pressió: 5-10 m/s.

La modificació substancial de la velocitat de circulació per tubs s'aconsegueix canviant el nombre de passis per tubs. Per tant, si el valor de veocitat per tubs obtingut no entra dins del rang típic, s'agafa un valor nou dins d'aquest rang i es recalcula el nombre de passos per tubs.

En el disseny dels diferents bescanviadors, la velocitat ha estat sempre dins dels rang i no ha calgut fer aquesta rectificació.

El pas següent és el càlcul del numero de pantalles deflectores i separació entre elles, les pantalles deflectores compleixen dos funcions principals:

- e. Serveixen de suport als tubs en la posició adequada durant el seu muntatge i operació, i a més a més prevenen vibracions dels tubs causats pel flux de toluè.
- f. Serveixen de guia pel toluè, a través dels tubs, incrementant la velocitat i el coeficient de transferència de calor.

Hi ha dos paràmetres que determinen les característiques geomètriques de les pantalles deflectores:

- L'altura lliure de la pantalla (*baffle cut*), espai que queda entre pantalla i carcassa per on passa el fluid. Correspon a un percentatge entre el 15 i el 45% del diàmetre de carcassa, com a valor òptim s'agafa un 25%.
- Espai entre pantalles ( $I_B$ ) que pren un valor entre 0,2 i 1 vegades el diàmetre de carcassa agafant com a número òptim 0,4.

El número de pantalles deflectores es pot calcular com:

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

### 5) CÀLCUL DE LES PÈRDUES DE PRESSIÓ

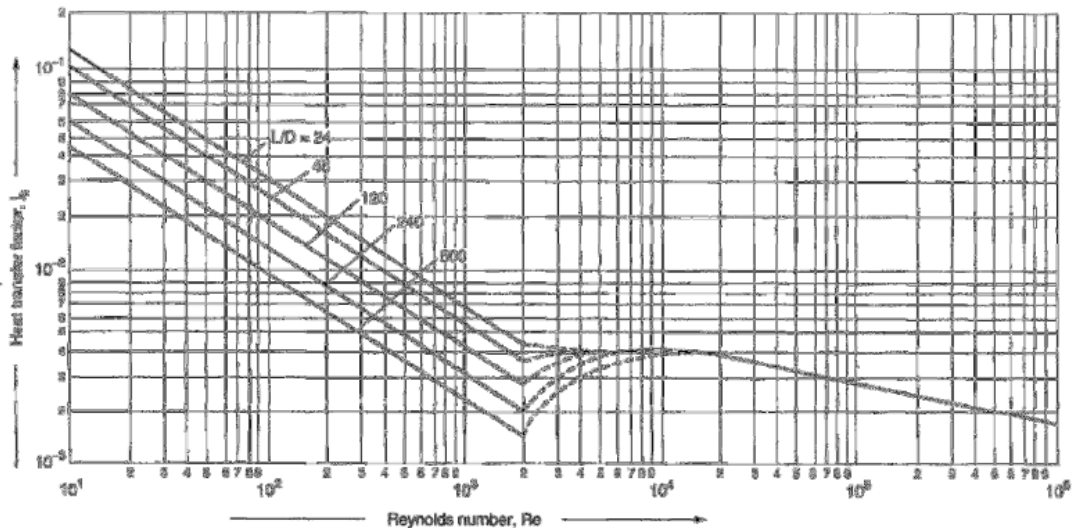
Es calculen les pèrdues de càrrega dels fluids que circulen tant per la carcassa com pels tubs, aquestes són principalment degudes a pèrdues de fricció i a contraccions i expansions del fluid.

Pel càlcul de la pèrdua de càrrega dels tubs només es consideren les pèrdues per fricció, cal tenir en compte que per trobar la pèrdua de càrrega dels fluids que circulen pels tubs es tindrà en compte només la pèrdua de càrrega en un sol tub, aquesta es pot estimar utilitzant la següent expressió.

$$\Delta P_t = 8 \cdot j_h \cdot \frac{\rho_t \cdot v_t^2}{2} \cdot \left( \frac{L}{D_i} \right)$$

on:

- $\Delta P_t$  = pèrdua de pressió (bar)
- $j_h$  = factor de fricció, que es calcula mitjançant la figura 12.24 de Coulson (adjunta) a partir del numero de Reynolds.



**Figura 12.8.2.6** Factor de transferència de calor pel costat de tubs a partir del número de Reynolds [Coulson and Richardson's, 3rd Edition, 1999]

- $\rho_t$ = densitat del fluid ( $\text{Kg/m}^3$ )
- $v_t$ = velocitat del fluid (m/s)
- L= longitud dels tubs (m)
- $D_i$ = diàmetre intern del tub (m)

Pel càlcul del Reynolds es segueix la següent metodologia:

Càlcul de l'àrea de pas d'un tub:

$$A_{pas\ 1\ tub} = \frac{\pi}{4} \cdot D_i^2$$

on:

- $A_{pas\ 1\ tub}$ = àrea de pas d'un tub ( $\text{m}^2$ )
- $D_i$ = diàmetre intern del tub (m)

Càlcul de l'àrea de pas de tots els tubs:

$$A_{pas\ t} = N_t \cdot \frac{A_{pas\ 1\ tub}}{n_{pt}}$$

on:

- $A_{pas\ t}$ = àrea de pas de tots els tubs ( $\text{m}^2$ )
- $N_t$ = numero de tubs
- $A_{pas\ 1\ tub}$ = àrea de pas d'un tub ( $\text{m}^2$ )

Càlcul del cabal de fluid:

$$G_{tub} = \frac{m_t}{A_{pas\ t}}$$

on:

- $G_{tub}$ = cabal del fluid per àrea (Kg/h·m2)
- $m_t$ = cabal màssic del fluid (Kg/h)
- $A_{pas\ t}$ = àrea de pas de tots els tubs (m2)

Càlcul del Reynolds:

$$Re = \frac{D_i \cdot G_{tub}}{\mu}$$

on:

- $Re$ = numero de Reynolds
- $D_i$ = diàmetre intern del tub (m)
- $G_{tub}$ = cabal del fluid per àrea (Kg/h·m2)
- $\mu$ = viscositat (Kg/h·m)

Pel càlcul de la velocitat del fluid que circula pels tubs s'utilitza la següent formula:

$$v_t = \frac{m_t}{\rho_t \cdot A_{pas\ 1\ tub} \cdot N_{tp}}$$

on:

- $v_t$ = velocitat del fluid (m/s)
- $m_t$ = cabal màssic del fluid (Kg/s)
- $\rho_t$ = densitat del fluid (Kg/m3)
- $A_{pas\ 1\ tub}$  = àrea de pas del tub (m2)
- $N_{tp}$ = numero de tubs

Pel càlcul de la pèrdua de càrrega de la carcassa només es consideren les pèrdues per fricció, aquestes es poden estimar utilitzant la següent expressió.

$$\Delta P_s = 8 \cdot j_F \cdot \frac{\rho_s \cdot v_s^2}{2} \cdot \left( \frac{D_s}{D_{eq}} \right) \cdot \left( \frac{L}{I_B} \right)$$

on:

- $\Delta P_s$  = pèrdua de pressió (bar)
- $j_F$  = factor de fricció, que es calcula mitjançant la figura 12.24 de Coulson a partir del numero de Reynolds.
- $\rho_s$  = densitat (Kg/m<sup>3</sup>)
- $v_s$  = velocitat (m/s)
- $L$  = longitud de la carcassa (m)
- $D_s$  = diàmetre intern de carcassa (m)
- $D_{eq}$  = diàmetre equivalent (m)

Pel càlcul del Reynolds es segueix la següent metodologia:

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

on:

- $Re$  = numero de Reynolds
- $D_{eq}$  = diàmetre equivalent (m)
- $G_s$  = cabal (Kg/h·m<sup>2</sup>)
- $\mu_s$  = viscositat (Kg/h·m)

Càlcul del diàmetre equivalent:

$$D_{eq} = \frac{1,10}{D_E} \cdot (\text{pitch}^2 - 0,917 \cdot D_E^2)$$

on:

- $D_{eq}$  = diàmetre equivalent (m)
- $D_E$  = diàmetre exterior tubs (m)
- $\text{pitch} = 1,25 \cdot D_E$  = distància entre els centres de dos tubs consecutius (m)

Càlcul del cabal:

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

on:

- $G_s$  = cabal (Kg/h·m<sup>2</sup>)
- $M_s$  = cabal màssic (Kg/h)
- $A_{st}$  = àrea transversal de carcassa (m<sup>2</sup>)



Càlcul de l'àrea transversal de carcassa:

$$A_{st} = \frac{I_B \cdot D_s \cdot (pitch - D_E)}{pitch \cdot n_{ps}}$$

on:

- $A_{st}$ = àrea transversal de carcassa ( $m^2$ )
- $I_B$ = espai entre pantalles (m)
- $pitch = 1,25 \cdot D_E$ = distància entre els centres de dos tubs consecutius (m)
- $D_E$ = diàmetre exterior de tubs (m)
- $n_{ps}$ = numero de passos per tubs (1)

Pel càlcul de la velocitat del fluid que circula per carcassa s'utilitzarà la següent formula:

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

on:

- $v_s$ = velocitat (m/s)
- $M_s$ = cabal màssic (Kg/s)
- $\rho_s$ = densitat ( $Kg/m^3$ )
- $A_{st}$ = àrea transversal de la carcassa ( $m^2$ )

Es consideren els següents límits per a les pèrdues de pressió:

- Líquids: amb viscositats menors a 1cP màxim  $35kN/m^2$  de pèrdua de pressió, per a viscositats entre 1 i 10 cP pèrdues de càrrega fins a  $70kN/m^2$ .
- Gasos i vapors: si es treballa amb buit elevat les pèrdues poden anar dels 0,4 als  $0,8kN/m^2$ , en condicions de buit mitjà fins a 0,1 de pressió absoluta, de 1 a 2 bars fins a 0,5 de pressió manomètrica i per situacions de més de 10 atmosferes el màxim és de 0,1 de pressió manomètrica.

### 12.8.2.3 Bescanviadors de carcassa i tubs BC-301 i BC-302

Els bescanviadors de carcassa i tubs BC-301 i BC-302 es dissenyen amb l'objectiu d'escalfar el foscè i l'MMA en forma gasosa des de  $8^{\circ}C$  i  $-6^{\circ}C$  fins a la temperatura d'entrada del reactor de formació de MCC,  $205^{\circ}C$  i  $240^{\circ}C$  respectivament. La temperatura d'operació és de  $260^{\circ}C$ , és per això que es preescalfen en aquest equip i

un cop dins del reactor assoleixen la temperatura de reacció amb la calor que es desprèn de la pròpia reacció exotèrmica de forma quasi instantània.

Aquestes substàncies s'emmagatzemen en forma de líquid a baixes temperatures i es vaporitzen abans d'entrar als bescanviadors BC-301 i BC-302 en els Evaporadorss EV-301 i EV-302 respectivament.

Per aportar la calor necessària es fa circular per carcassa oli tèrmic a una temperatura de 300°C.

#### **12.8.2.4 Bescanviador de carcassa i tubs BC-303**

El bescanviador de calor de carcassa i tubs BC-303 refreda el toluè utilitzat per absorbir els productes en forma de gas que surten del reactor R-301.

La columna AB-301 té dues funcions principals, dissoldre l'MCC i l'HCl en el dissolvent de procés, toluè, i al mateix temps refredar-los ja que surten del reactor a una temperatura molt elevada, 260°C.

El toluè que s'introdueix per la part superior prové del tanc pulmó TP-301 on es troben la corrent de toluè fresc, des del tanc d'emmagatzematge a temperatura ambient, i el toluè amb traces de MCC recirculat des del reactor de piròlisis. En aquest tanc pulmó la temperatura és massa elevada per tal de refredar els gasos de la forma esmentada i és per això que es disposa del bescanviador BC-303 per on circula toluè a -10°C el qual emportar-se l'excés de calor.

#### **12.8.2.5 Bescanviador de carcassa i tubs BC-501**

El bescanviador de calor de carcassa i tubs BC-501 refreda el MIC que surt per caps de la columna CD-403 fins a 20°C. El MIC te una temperatura d'ebullició de 39°C i interessa que entri en forma de líquid al reactor R-501/2 perquè es barregi amb la dissolució d'1-naftol en toluè sense problemes.

Un cop en el reactor la substància s'escalfarà fins a la temperatura d'operació amb la pròpia calor de reacció (93°C) ja que aquesta és exotèrmica.

Per emportar-se l'excés de calor es fa circular toluè a -10°C per carcassa.

### **12.8.2.6 Bescanviador de carcassa i tubs BC-502**

En el cas de que fos necessari emmagatzemar el MIC en els tancs T-501/2, caldria refredar-lo fins a 4°C, temperatura a la que es troba líquid i estable en els tancs, abans d'introduir-lo, és per aquest motiu que es disposa d'un bescanviador de carcassa i tubs previ als l'entrada dels tancs. Per emportar-se l'excés de calor es fa circular toluè fred per la carcassa de l'equip.

### **12.8.2.7 Bescanviador de carcassa i tubs BC-601, BC-602 i BC-603.**

Part de la solució mare que surt dels cristal·litzadors és recirculada de nou a l'equip per tal de millorar-ne l'eficiència, abans d'introduir-la en el mateix aquesta s'escalfa 6 graus per sobre de la temperatura d'operació del cristal·litzador (65°C) aconseguint així redissoldre part del Carbaryl cristal·litzat i al mateix aportant calor a l'aparell.

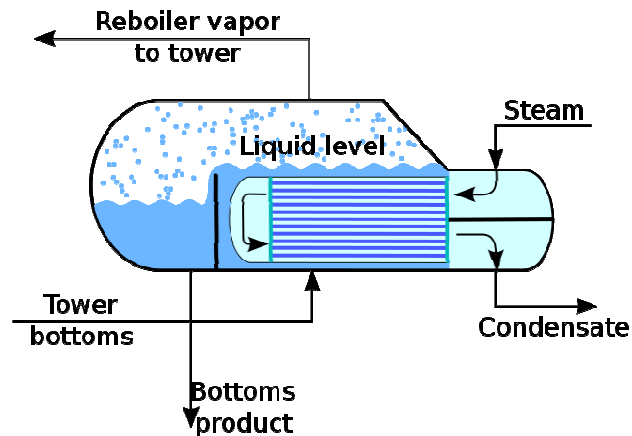
Amb l'objectiu d'escalfar la part recirculada de licor mare s'instal·len tres bescanviadors de carcassa i tubs, un per cada cristal·litzador on el fluid de procés s'escalfarà fins a 71°C fent circular oli tèrmic per la carcassa a 150°C.

## **12.8.3 EVAPORADORS**

### **12.8.3.1 Introducció**

La funció principal d'aquest tipus de bescanviadors de calor és portar un fluid a la seva temperatura d'ebullició per tal de que se'n generi el seu vapor.

També coneguts amb el nom de calderes, aquests equips es troben en la part inferior de totes les columnes de destil·lació de la planta per tal de vaporitzar una part del producte de cues i retornar-lo després de nou a la torre. El líquid que entra en el Evaporadors des de l'última etapa, és parcialment evaporat, on la part restant surt com a producte de cues o és retornada de nou a l'etapa inferior de la columna.



*Figura 12.8.3.1 Esquema d'un intercanviador de calor de tipus Evaporadors.*

A més dels reboilers que formen part de les operacions de fraccionament, a la planta hi ha dues calderes més, una per a evaporar el fosc líquid des dels tancs d'emmagatzematge T-101 i T-102 i una altra per evaporar l'MMA, emmagatzemat també en forma de líquid, abans de que ambdós productes entrin al reactor R-301 en forma de gas.

En aquests equips el fluid de procés que cal evaporar circula per carcasses amples i separades del feix de tubs interior on disposa de l'espai suficient per expandir-se durant l'ebullició sense causar sobrepressió, el fluid calefactor, en aquest cas oli tèrmic, circula sempre per l'interior dels tubs. Els coeficients de transferència de calor acostumen a ser baixos degut a la poca circulació de fluid que hi ha en l'interior, els temps de residència són elevats i no són recomanats per treballar amb fluids que provoquen embrutiment

### 12.8.3.2 Disseny funcional i mecànic

Per al disseny mecànic i funcional dels bescanviadors de tipus evaporadors, s'ha utilitzat el programa *Aspen Exchanger Design & Rating V.7.3*, de la mateixa manera que s'ha fet en el cas dels bescanviadors de carcassa i tubs.

### 12.8.3.3 Evaporadors EV-301 i EV-302

L'objectiu dels Evaporadors EV-301 i EV-302 és evaporar el foscè i l'MMA que es troben emmagatzemats en forma de líquid en els tancs T-101, T-102, T-103 i T-104, aquestes dues substàncies generen vapors perillosos, tant per la seva toxicitat com per la seva inflamabilitat, i es decideix emmagatzemar-les en forma de líquid.

En el procés, es necessiten en la seva forma gasosa i el canvi de fase té lloc en un bescanviador de calor de tipus rebolier ja que per el seu disseny és el més indicat.

A la sortida dels equips EV-301 i EV-302 el foscè i l'MMA seran conduïts a dos bescanviadors de carcassa i tubs encarregats de seguir augmentant la seva temperatura.

L'aportació de calor necessari en el canvi de fase es farà fent circular oli tèrmic calent pels tubs del bescanviador, normalment l'oli es fa circular per carcassa, però en aquest cas el fluid de procés és el que circula per l'exterior dels tubs degut al augment de volum que pareix en passar a vapor.

### 12.8.3.4 Evaporadors EV-303, EV-304, EV-401 i EV-601.

El líquid que circula de forma descendent per les columnes de destil·lació arriba a la part inferior i és introduït en els diferents bescanviadors de calor de tipus Evaporadors, EV-303, EV-304, EV-401 i EV-601, on té lloc la vaporització dels gasos que després circularan cap a la part superior. El líquid entra en els bescanviadors de calor des de l'última etapa i és parcialment evaporat, la part que roman líquida es divideix, una fracció surt com a producte de cues i l'altre és retornada de nou a l'etapa inferior de la columna.

Per aportar la calor necessària als equips s'utilitza oli tèrmic el qual circula pels tubs a una temperatura elevada.

## 12.8.4 CONDENSADORS

### 12.8.4.1 Introducció

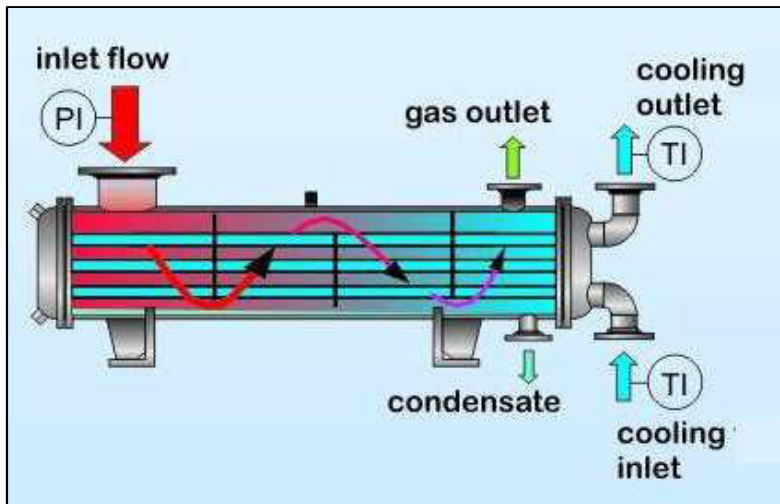
El condensador és una unitat en la que els vapors de procés es liquen total o parcialment en líquids. El calor latent dels vapors s'absorbeix gracies a un fluid més fred, anomenat refrigerant, que a la vegada s'escalfa i surt més calent. El vapor que condensa pot ser una substància pura o una barreja. Generalment, la condensació es dona a pressió constant i es pot considerar un procés isoterm en el cas de les substàncies pures; per les barreges la condensació es dona en un interval de temperatures.

Els mecanismes de condensació sobre una superfície freda són:

- Condensació en pel·lícula: on el condensat mulla la superfície i forma una capa de líquid que es mou pel tub per acció de la gravetat.
- Condensació en gotes: on el condensat forma gotes de mida variable que es van ajuntant fins que són suficientment grans per caure per gravetat.

Encara que la condensació en gotes implica uns coeficients de cinc a vuit vegades més grans que en el cas de la condensació en pel·lícula, no s'acostuma a considerar degut a la seva inestabilitat i a la dificultat de mantenir-la durant el procés.

A la figura 12.8.4.1 es presenta un esquema dels condensadors de carcassa i tubs, que són els utilitzats en el procés.



**Figura 12.8.4.1** Condensador de carcassa i tubs.

En el cas de la planta química per a la producció de carbaril, es tenen dos condensadors parcials: C-401 i C-402, que s'utilitzen per a separar l'HCl de la mescla que surt del reactor de piròlisi. També es tenen els condensadors totals de cada columna de destil·lació (C-302, C-303, C-403 i C-601), un condensador total (C-301) que permet refredar la mescla abans d'entrar a la columna CD-301 i un condensador total (C-602) que tracta les sortides de toluè dels cristal·litzadors.

#### 12.8.4.2 Disseny funcional i mecànic

Per al disseny mecànic i funcional de la major part dels condensadors, s'ha utilitzat el programa *Aspen Exchanger Design & Rating V.7.3*, igual en el cas dels bescanviadors de carcassa i tubs i Evaporadors.

Hi ha dos condensadors a la planta, C-401 i C-401, que participen de forma especialment important en el procés ja que, a més de condensar el fluid de procés, s'utilitzen com a equips de separació. Per a el seu disseny s'ha seguit un mètode diferent el qual és també explicat en un subapartat d'aquest capítol.

### 12.8.4.3 Condensador C-301

La funció del condensador C-301 és passar a líquid part del corrent d'entrada a la columna CD-301, aquesta columna treballa a 26 atmosferes i per tant cal comprimir la seva entrada.

Des de la columna d'absorció AB-301 surt per la part superior un gas dirigit cap a la torre de destil·lació esmentada, aquest vapor és comprimit i durant el procés guanya temperatura escalfant-se des de 93°C fins a 273°C, gràcies al condensador C-301 part d'aquest vapor passa a líquid i l'entrada a la columna CD-301 es refreda per un òptim funcionament de la separació entrant una fracció en forma de gas i una altra en forma de líquid.

Per tal d'emportar-se l'excés de calor d'aquest corrent es fa circular toluè a 15°C pels tubs del condensador sortint el gas i el líquid a una temperatura igual a 203°C.

### 12.8.4.4 Condensador C-302, C-303, C-403 i C-601

Per controlar la temperatura de caps de les diferents columnes de destil·lació de la planta la variable que es manipula és el cabal de reflux, com més gran sigui aquest cabal menor serà la temperatura a la part superior i a la inversa ja que la columna s'enriqueix de component lleuger i disminueix el punt d'ebullició de la mescla.

Per fer possible aquest reflux cal disposar de condensadors que passin a líquid part dels vapors que es generen i arriben a la zona de caps. Els condensadors C-302, C-303, C-403 i C-601 treballen de forma conjunta amb diferents tancs pulmons per fer possible el funcionament de les columnes de separació.

De nou, per emportar-se l'excés de calor el fluid utilitzat serà el toluè ja que és el dissolvent de procés i no suposaria un perill en cas de fuga dins de l'aparell.

### 12.8.4.5 Condensador C-401 i C-402

#### **DESCRIPCIÓ DEL PROCÈS DE CàLCUL**

Per a el disseny dels condensadors s'utilitzen dos subprogrames del Hysys que són el "Cooler" amb el que es baixa la temperatura del fluid a la temperatura de condensació i la de "Separator" amb la que es separa la fase gas de la fase líquida; això es fa degut a que el Hysys no conte un subprograma específic per a simular condensadors.



Les dades que requereixen els subprogrames per funcionar són:

- Cabal i composició del corrent d'entrada
- Temperatura de condensació
- Pressió de condensació

### **DECISIÓ DEL PAQUET DE PROPIETATS**

Abans de realitzar qualsevol disseny, s'ha de decidir quina equació d'estat o model d'activitat es farà servir per definir l'equilibri de fases de la mescla en els condensadors. Una bona elecció del paquet de propietats és essencial alhora de fer un bon disseny, ja que tot el disseny posterior depèn d'aquest. El millor paquet depèn de les propietats de la mescla, com la polaritat o la pressió. Per escollir el paquet es fa servir l'escrit "*Don't Gamble With Physical Properties For Simulations*". Aquest escrit es basa en una sèrie d'esquemes que diuen quin paquet utilitzar segons les propietats de la mescla.

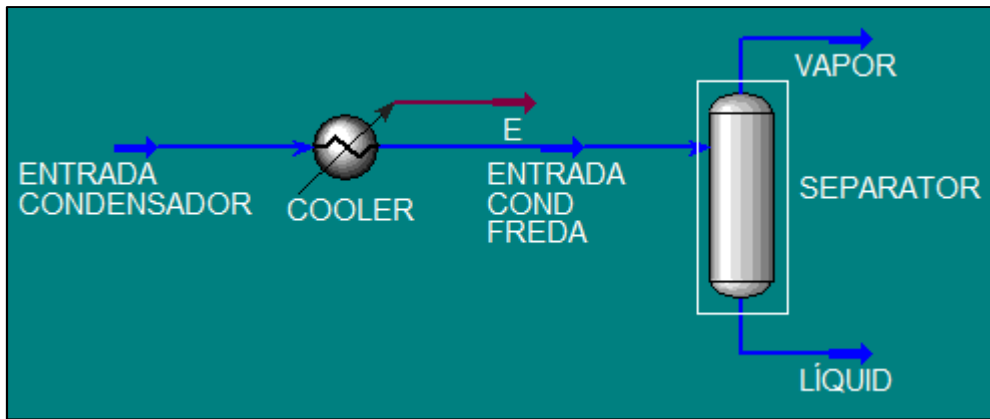
A partir d'aquests esquemes i considerant les propietats de les diferents mescles a utilitzar en cada condensador s'arriba a la conclusió que la millor opció és utilitzar el paquet NRTL pel líquid i Peng-Robinson pel vapor.

### **Condensador C-401**

L'objectiu del condensador C-401 es separar l'HCl de la mescla de la sortida de piròlisi, i obtenir un líquid ric en MIC que entra a la columna de refinat TD-401.

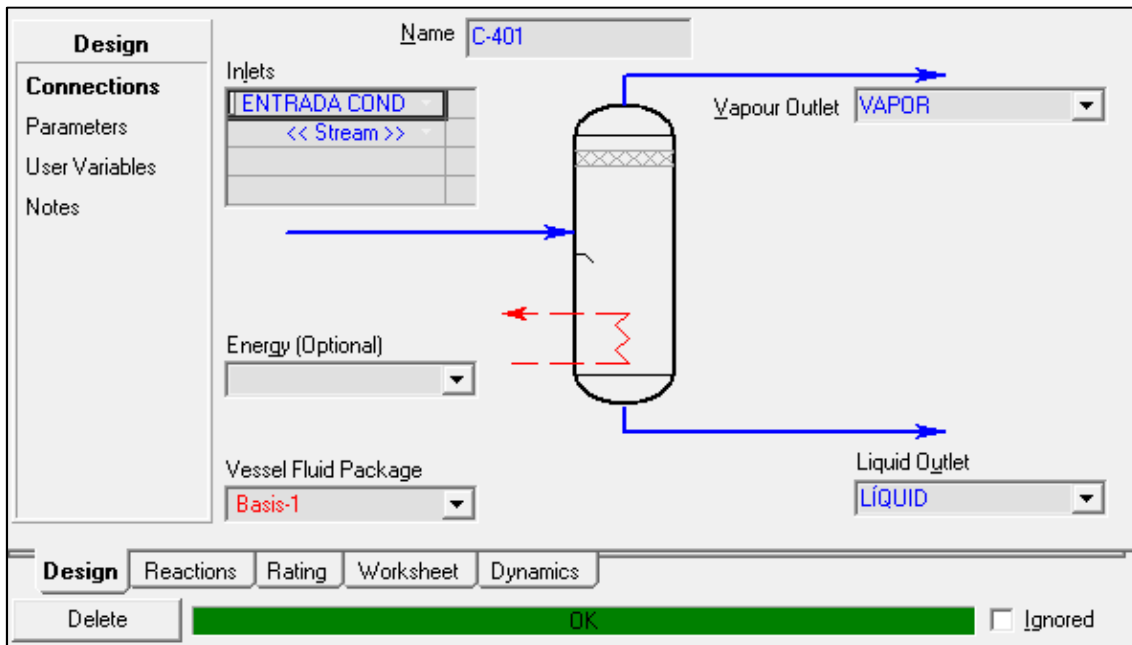
#### **Disseny funcional**

Es defineix el corrent d'entrada, corresponent a la sortida gasosa de piròlisi i es provenen diferents temperatures de condensació per poder obtenir la separació desitjada. Finalment, es decideix utilitzar una temperatura de condensació de 20°C. A la figura 12.8.4.2, es presenta l'esquema utilitzat en el Hysys "Cooler+Separator".



**Figura 12.8.4.2.** Esquema utilitzat en el Hysys "Cooler+Separator" per al disseny del condensador C-401

A la figura 12.8.4.3 es presenta la pàgina principal del Hysys pel disseny del condensador C-401.



**Figura 12.8.4.3.** Pàgina principal del disseny del condensador C-401.

A les taules 12.8.3.1 i 12.8.3.2 es presenten les condicions de treball i composicions al condensador C-401 obtingudes amb el Hysys.

**Taula 12.8.4.1** Condicions de treball al condensador C-401.

	ENTRADA	SORTIDA LÍQUIDA	SORTIDA VAPOR
<b>Fracció vapor</b>	0,3536	0,0000	1,0000
<b>Temperatura (°C)</b>	20,0	20,0	20,0
<b>Pressió (Kpa)</b>	101,3	101,3	101,3
<b>Cabal molar (Kmols/h)</b>	29,81	19,27	10,54
<b>Cabal màssic (Kg/h)</b>	1927	1492	435
<b>Cabal de líquid (m3/h)</b>	2,1820	1,6930	0,4896
<b>Entalpia molar (KJ/Kmol)</b>	-5,63E+04	-4,06E+04	-8,52E+04
<b>Entropia molar (KJ/Kmol·°C)</b>	35,53	-37,71	169,40
<b>Flux de calor (KJ/h)</b>	-1,68E+06	-7,82E+05	-8,98E+05

**Taula 12.8.4.2** Composicions dels cabals al condensador C-401.

	ENTRADA	SORTIDA LÍQUIDA	SORTIDA VAPOR
<b>MCC</b>	0,0323	0,0481	0,0035
<b>HCl</b>	0,3008	0,0274	0,8006
<b>MIC</b>	0,3076	0,3776	0,1795
<b>Toluè</b>	0,3593	0,5468	0,0164
<b>Fosgè</b>	0,0000	0,0000	0,0000
<b>1-naftol</b>	0,0000	0,0000	0,0000
<b>Carbaril</b>	0,0000	0,0000	0,0000

Per tant, una vegada realitzat el disseny amb el Hysys, es pot saber la composició i cabal de sortida tant gasosa com líquida. A més, mitjançant el disseny amb el “cooler” es pot saber el calor necessari a bescanviar, corresponent a  $8,027 \cdot 10^5$  KJ/h. Per tant, es pot passar a realitzar el dimensionat del condensador amb el programa Aspen exchanger design and rating V.7.3.

### **Condensador C-402**

L'objectiu del condensador C-402 es separar completament l'HCl de la mescla de sortida gasosa del condensador C-401.

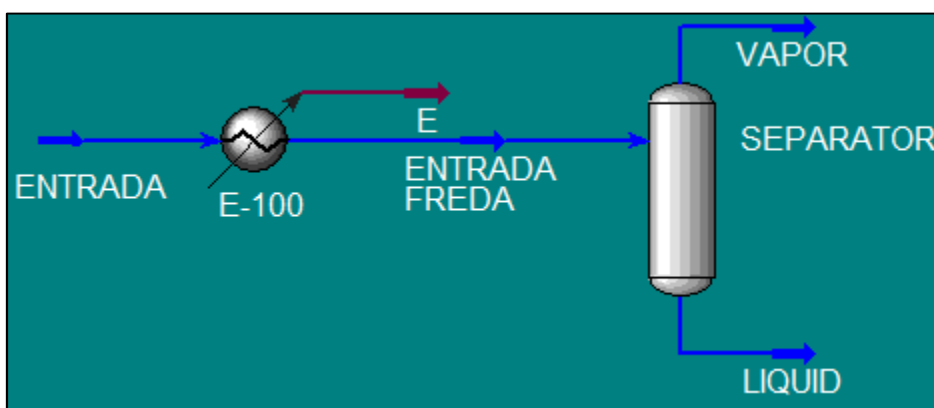
#### **Disseny funcional**

Com en el cas de la columna CD-401, es considera que hi ha reacció química degut a les baixes temperatures entre l'HCl i el MIC per donar MCC. En el condensador C-401 no hi ha reacció degut a que gran part del MIC està dissolt en el toluè i l'HCl no, per

tant no hi ha contacte entre aquests dos compostos i s'ha suposat que no hi ha reacció.

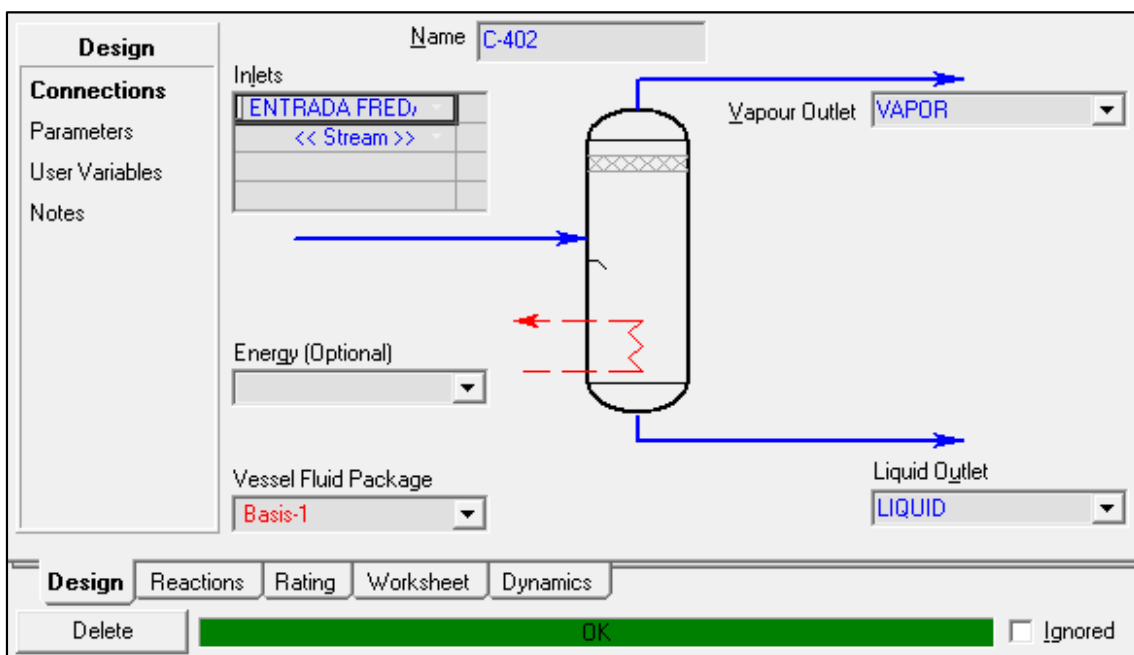
Per considerar la reacció química, es modifica l'entrada considerant que els mols de MIC que entren (limitant) reaccionen amb els mateixos mols d'HCl per donar MCC, que surt per cues.

Es defineix el corrent d'entrada, corresponent a la sortida gasosa del condensador C-401 i es proven diferents temperatures de condensació per poder obtenir la separació desitjada. Finalment, es decideix utilitzar una temperatura de condensació de 10°C. A la figura 12.8.4.3, es presenta l'esquema utilitzat en el Hysys "Cooler+Separator".



**Figura 12.8.4.3.** Esquema utilitzat en el Hysys "Cooler+Separator" per al disseny del condensador C-402.

A la figura 12.8.4.4 es presenta la pàgina principal del Hysys pel disseny del condensador C-402.



**Figura 12.8.4.4** Pàgina principal del disseny del condensador C-402.

A les taules 12.8.4.3 i 12.8.4.4 es presenten les condicions de treball i composicions al condensador C-402 obtingudes amb el Hysys.

**Taula 12.8.4.3** *Condicions de treball al condensador C-402. L'entrada ha sigut modificada per tenir en compte la reacció química.*

	ENTRADA	SORTIDA LÍQUIDA	SORTIDA VAPOR
Fracció vapor	0,7803	0,0000	1,0000
Temperatura (°C)	10,0	10,0	10,0
Pressió (Kpa)	101,3	101,3	101,3
Cabal molar (Kmol/h)	8,55	1,878	6,672
Cabal màssic (Kg/h)	429,9	171,2	258,7
Cabal de líquid (m3/h)	0,5366	0,2335	0,3031
Entalpia molar (KJ/Kmol)	-1,15E+05	-1,84E+05	-9,58E+04
Entropia molar (KJ/Kmol·°C)	157,60	101,20	173,50
Flux de calor (KJ/h)	-9,85E+05	-3,46E+05	-6,39E+05

**Taula 12.8.4.4** *Composicions dels cabals al condensador C-402.L'entrada ha sigut modificada per tenir en compte la reacció química.*

	ENTRADA	SORTIDA LÍQUIDA	SORTIDA VAPOR
MCC	0,2227	0,8748	0,0391
HCl	0,7573	0,0394	0,9594
MIC	0,0000	0,0000	0,0000
Toluè	0,0200	0,0858	0,0015
Fosgè	0,0000	0,0000	0,0000
1-naftol	0,0000	0,0000	0,0000
Carbaril	0,0000	0,0000	0,0000

Per tant, una vegada realitzat el disseny amb el Hysys, es pot saber la composició i cabal de sortida tant gasosa com líquida. A més, mitjançant el disseny amb el “cooler” es pot saber el calor necessari a bescanviar, corresponent a  $1,191 \cdot 10^4$  KJ/h. Per tant, es pot passar a realitzar el dimensionat del condensador amb el programa Aspen exchanger design and rating V.7.3.

#### 12.8.5.6 Condensador C-602

Per fer el buit en els cristal·litzadors de purificació de Carbaryl s'evapora gran part del toluè utilitzat com a dissolvent, per tal d'aprofitar de nou aquest component el condensador C-602 el refreda portant-lo a la seva temperatura de condensació, un cop en estat líquid part del toluè retorna al tanc TM-601 on es mescla amb la sortida seca de la centrífuga CT-602 per redissoldre el Carbaryl que s'introduirà a la centrífuga CR-602, la resta de toluè condensat es dirigeix cap al tanc TM-502 per a dissoldre l'1-naftol que reaccionarà amb el MIC en el reactor R-501/2 entrant de nou en el procés d'es d'aquest punt.

Per emportar-se l'excés de calor, el fluid utilitzat serà toluè a baixa temperatura, 35°C en aquest cas.

## 12.9 DISSENY DE CRISTALITZADORS

### 12.9.1 INTRODUCCIÓ

La cristal·lització és un procés on es formen partícules sòlides a partir d'una fase homogènia, aquest procés pot ser la congelació de l'aigua per formar gel, la formació de partícules de neu a partir d'un vapor, la formació de partícules sòlides en un material fos o la formació de cristalls sòlids en el si d'una solució líquida, sent aquest últim el de major importància comercial.

El principi bàsic de la cristal·lització es aconseguir la sobresaturació de la substància de quina es desitja obtenir cristalls, aquesta es refereix a l'estat en que el dissolvent conté més sòlids dissolts dels que pot tolerar a una certa temperatura [Warren L McCabe, 2002].

La cristal·lització de solucions és important en la indústria a causa de la gran varietat de materials que es comercialitzen en forma cristal·lina. La seva àmplia utilitat es deu a dues raons: un cristall format a partir d'una solució impura és essencialment pur (a excepció que es formin cristalls mixtes), i la cristal·lització proporciona un mètode pràctic per a l'obtenció de substàncies químiques pures en una condició adequada per al seu envasat i emmagatzematge.

Una altra cosa que s'ha de tindre en compte per entendre el concepte de cristal·lització es que, la barreja bifàsica formada pels líquids mares i els cristalls de totes les mides, continguda en un cristal·litzador i que es treu com a producte, rep el nom de magma.

En la formació d'un cristall es requereixen dues etapes, el naixement d'una nova partícula, etapa de nucleació, i el seu posterior creixement fins a una mida determinada, etapa de creixement.

En un cristal·litzador la distribució de la mida de partícula ve determinada per la interacció de les velocitats de nucleació i de creixement, sent el procés global cinèticament complicat, per lo que el potencial impulsor per a ambdues velocitats és la sobresaturació.

### 12.9.1.1 Etapa de nucleació

La nucleació es refereix al naixement de cossos molt petits a l'interior d'una fase homogènia sobresaturada. La velocitat de nucleació es pot definir com: la formació de partícules noves per unitat de temps i unitat de volum de magma o de licor mare exempt de sòlids.

Existeixen diferents tipus de nucleació i poden classificar-se en tres grups: nucleació espúria, nucleació primària i nucleació secundària.

- Nucleació espúria: el creixement dels cristalls es dona quan hi ha sobresaturacions elevades o quan la circulació del magma es deficient, aquest creixement es anormal ja que es formen agulles o escombretes des de els extrems dels cristalls que, en aquestes condicions, poden créixer molt més ràpid que les cares o els costats.
- Nucleació primària: ocorre en absència d'una interfase sòlida. Els àtoms o molècules es combinen en una sèrie de "reaccions" per produir agregats ordenats o embrions on alguns d'ells superen una mida crítica convertint-se en nuclis i la resta es dissolen. La velocitat de nucleació primària es altament no lineal amb la sobresaturació de la dissolució, sent propera a zero per valors baixos de sobresaturació, regió metastable, i augmentant ràpidament quan s'assoleix la sobresaturació crítica, regió inestable. Per lo tant, s'espera un domini de la nucleació primària a sobresaturacions elevades.
- Nucleació secundària: ocorre per varis possibles mecanismes i depèn també de la sobresaturació degut a que els nuclis només creixen si superen una mida crítica:
  - En processos amb sembra de cristalls: pols de cristalls que fa de nuclis (nucleació aparent).
  - En cristal·litzacions molt ràpides: on es generen agulles o dendrites en els cristalls en creixement, que es trenquen amb facilitat i serveixen com a nuclis.
  - En nucleació de contacte: els cristalls en creixement entren en contacte entre si, amb les parets del recipient o amb l'agitador. Es produeixen així petites partícules per trencaments, que serveixen com a nuclis.



### 12.9.1.2 Etapa de creixement

El creixement dels cristalls es un procés difusional, modificat per l'efecte de les superfícies sòlides sobre les superfícies on es produeix el creixement. Les molècules o ions del solut arriben a les cares en creixement d'un cristall per difusió a través de la fase líquida i tenen que ser acceptades pel cristall i organitzar-se dins de la xarxa. Aquesta reacció ocorre en la superfície amb una velocitat finita i el procés global consta de dues etapes, cap d'aquestes té lloc si no hi ha sobresaturació.

### 12.9.1.3 Sobresaturació

La sobresaturació es la diferència de concentració entre la solució sobresaturada, en la que el cristall està creixent, i la de la solució en equilibri amb el cristall, aquestes dues fases estan aproximadament a la mateixa temperatura. Hi ha diferents maneres de sobresaturar una mescla:

- Sobresaturació per refredament: Se utilitza en solucions que es troben saturades, aquest mètode involucra una disminució de la temperatura de la solució amb la finalitat d'aconseguir condicions de baixa solubilitat i per això una notable sobresaturació que comporta a la cristallització. Aquest procés es fa sense evaporació apreciable. S'utilitza quan la solubilitat del solut varia sensiblement amb la temperatura.
- Sobresaturació per refredament evaporatiu: S'utilitza quan la solubilitat del solut es molt sensible a la temperatura i el refredament es produeix mitjançant un sistema al buit. L'alimentació entra a una temperatura major que la que hi ha al cristallitzador refredant-se adiabàticament dins d'aquest.
- Sobresaturació per evaporació tèrmica: Aquest mètode s'utilitza quan la solubilitat dels soluts es casi independent de la temperatura per lo que es recorre a la evaporació del dissolvent. Amb aquesta evaporació els soluts assoleixen els límits de la seva solubilitat i comencen a aparèixer els primers cristalls.
- Sobresaturació per evaporació tèrmica al buit: Aquest mètode s'utilitza quan la solubilitat dels soluts tenen una dependència intermitja respecte a la temperatura. En aquest modo la alimentació té una temperatura major que la que hi ha al

crystal·litzador per lo que es refreda adiabaticament al entrar a l'equip, paral·lelament es transfereix calor al sistema per evaporar el solvent amb ajuda d'un sistema al buit.

#### 12.9.1.4 Equips de cristal·lització

Els cristal·litzadors comercials poden diferir en diferents aspectes, una diferencia important resideix en la manera en que els cristalls es posen en contacte amb el líquid sobresaturat, per lo que existeixen dos tècniques:

- Mètode del líquid circulant: En aquesta tècnica els primers cristalls creixen en una part del cristal·litzador mentre que el licor mare circula a través del mateix incrementant la seva sobresaturació en una altre part de l'equip, ja sigui per evaporació del dissolvent o refredament de la solució, fins el creixement dels cristalls. Quan es torna a assolir el punt de sobresaturació aquest licor mare es torna a recircular.
- Mètode del magma circulant: En aquesta tècnica no es separen els sòlids dels líquids, sinó que circulen junts, formant el magma, i passen per les dos etapes que son evaporació i cristal·lització.

La major part dels cristal·litzadors utilitzen alguna forma d'agitació per millorar la velocitat de creixement, per prevenir la segregació de la solució sobresaturada que dona lloc a una nucleació excessiva i per mantenir els cristalls en suspensió en la zona de cristal·lització. Es possible utilitzar agitadors interns, provistos amb freqüència de tubs d'aspiració i plaques deflectores, i bombes externes per la circulació del líquid o el magma a traves de les zones de sobresaturació o cristal·lització. Aquest últim mètode rep el nom de circulació forçada.

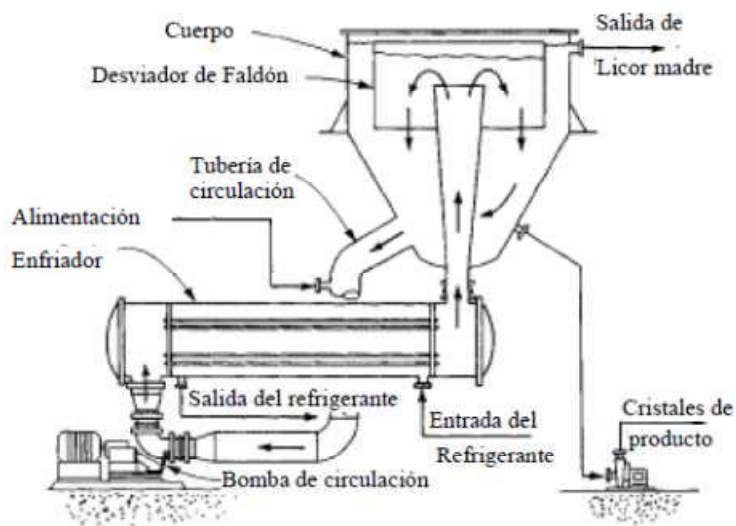
### 12.9.1.5 Tipus de cristal·litzadors

#### 12.9.1.5.1 Cristal·litzador de suspensió mesclada i de retirada de productes combinats

Aquest tipus d'equip, anomenat a vegades cristal·litzador de magma circulant, és el més important dels que s'utilitzen en l'actualitat. En la major part dels equips comercials d'aquest tipus, la uniformitat de la suspensió dels sòlids del producte en el cos del cristal·litzador és suficient perquè es pugui aplicar la teoria. Tot i que s'inclouen certes característiques i varietats diferents en aquesta classificació, l'equip que funciona a la capacitat més elevada és del tipus en què es produeix comunament la vaporització d'un dissolvent, gairebé sempre aigua.

#### 12.9.1.5.2 Cristal·litzador per refredament superficial

Aquest equip consta d'un bescanviador de carcassa i tubs de circulació forçada en combinació directa amb el cos del cristal·litzador de tub d'extracció. Aquest tipus d'equip produeix cristalls en la gamma de malla de 30 a 100 i el disseny es basa en les velocitats admissibles d'intercanvi de calor i la retenció que es requereix per al creixement dels cristalls de producte .

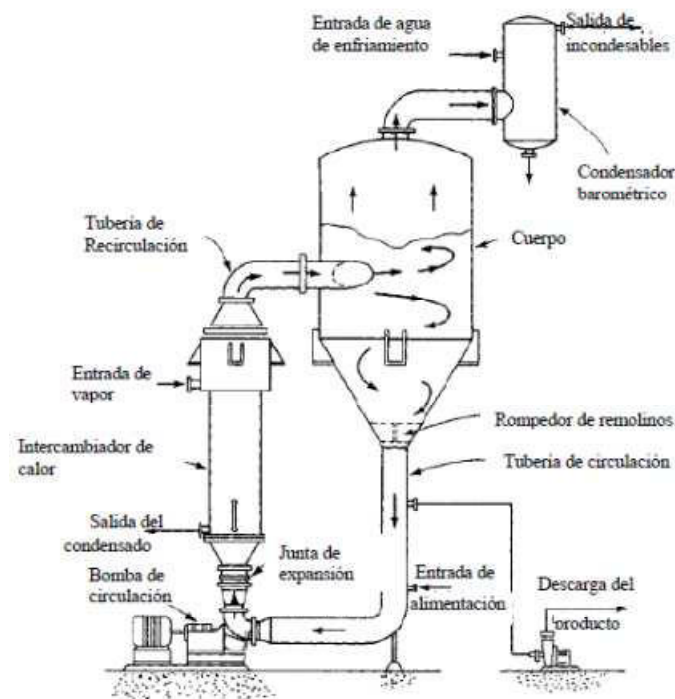


**Figura 12.9.1.1** Cristal·litzador per refredament superficial

### 12.9.1.5.3 Cristal·litzador d'evaporació de circulació forçada

Aquest equip consta a més a més del cos del cristal·litzador i del bescanviador de carcassa i tubs, d'un condensador que treballa al buit que el que fa es evaporar el dissolvent dins del cristal·litzador afavorint la cristal·lització.

La corrent d'alimentació, abans d'entrar al cristal·litzador, es mescla amb una part de la corrent de sortida, recirculació, i es bombeja a través d'una canonada de circulació per passar per un bescanviador on la seva temperatura s'eleva de 2 a 6 graus, això afavoreix la saturació de la mescla i que està entre sobresaturada al cristal·litzador. La quantitat i la velocitat de la recirculació, la mida del cos, el tipus i la velocitat de la bomba de circulació són conceptes crítics de disseny, per poder obtenir resultats predictibles.



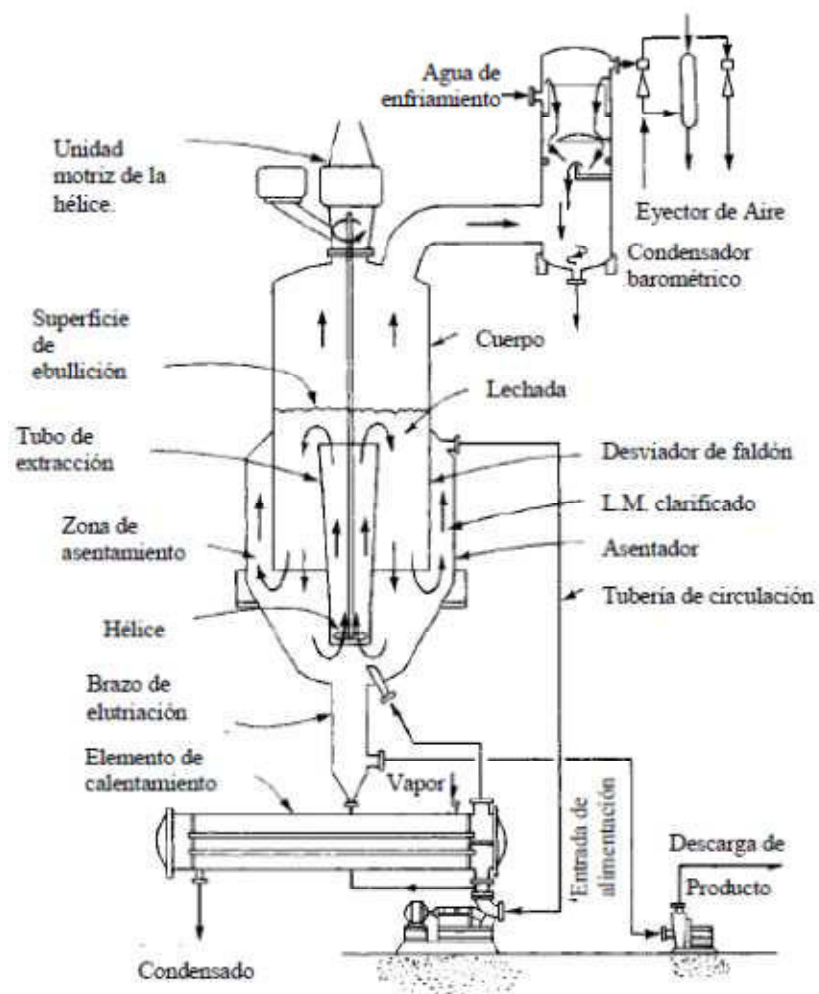
*Figura 12.9.1.2 Cristal·litzador d'evaporació de circulació forçada*

### 12.9.1.5.4 Cristal·litzador evaporador de desviador i tub d'extracció (DTB) .

Ja que la circulació mecànica influeix considerablement en el nivell de nucleació dins del cristal·litzador, s'han desenvolupat molts dissenys que utilitzen circuladors situats dins del cos del cristal·litzador, reduint així la càrrega de bombejament que s'exerceix

sobre el circulador . Aquesta tècnica redueix el consum de potència i la velocitat de punta del circulador i ,per tant, la rapidesa de nucleació.

La suspensió dels cristalls es manté mitjançant una hèlix gran i de moviment lent, envoltada per un tub d'extracció, aquesta dirigeix el magma cap a la superfície del líquid per evitar que els sòlids posin en curtcircuit la zona de sobresaturació més intensa. Aquest disseny consta de una característica de destrucció de partícules fines que comprèn la zona d'assentament que envolta el cos del cristal·litzador, la bomba de circulació i l'element escalfador, aquest últim proporciona suficient calor per satisfer els requisits d'evaporació i eleven la temperatura de la solució retirada del assentador amb la finalitat de destruir totes les partícules cristal·lines petites que es retiren. Els cristalls gruixuts se separen de les partícules fines a la zona d'assentament per sedimentació gravitacional.



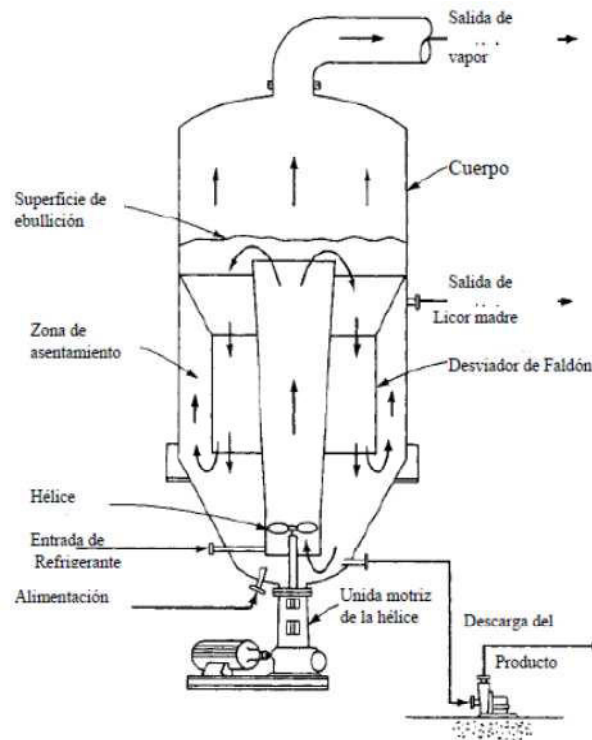
**Figura 12.9.1.3** Cristal·litzador d'evaporació DTB

#### 12.9.1.5.5 Cristal·litzador de refrigeració de contacte directe

Per a algunes aplicacions, és necessari arribar a temperatures tan baixes que facin que el refredament mitjançant l'ús de refrigerants sigui la única solució econòmica. En aquests sistemes a vegades no resulta pràctic emprar equips de refredament superficial degut a que la diferència admissible de temperatures és tan baixa, menys de 3°C, que la superfície d'intercanvi de calor es fa excessiva o, perquè la viscositat és tan elevada que la energia mecànica aplicada pel sistema de circulació és més gran que el que es pot obtenir amb diferències raonables de temperatura. En aquests sistemes, és convenient barrejar el refrigerant amb el magma que es refreda al cristal·litzador, de manera que la calor de vaporització del refrigerant sigui relativament immiscible amb el licor mare i capaç de patir separació, compressió, condensació i un reciclatge subsegüent en el sistema de cristal·lització. Les pressions operacionals i les temperatures escollides tenen una influència important sobre el consum de potència.

#### 12.9.1.5.6 Cristal·litzador de tub d'extracció ( DT )

Aquest cristal·litzador es pot emprar en sistemes en què no es vol ni es necessita la destrucció de les partícules fines. En els cristal·litzadors DT i DBT, la velocitat de circulació a la que s'arriba sol ser molt més gran que la que s'obté en un cristal·litzador similar de circulació forçada per lo que s'utilitzen quan es necessari fer circular grans quantitats de magma per minimitzar els nivells de sobresaturació dins de l'equip. Els dissenys de tub d'extracció i desviadors s'utilitzen comunament per a la producció de materials granulars, de malla 8 a la 30 , com el sulfat d'amoni , clorur de potassi i altres vidres inorgànics i orgànics .



**Figura 12.9.1.4** Cristal·litzador de tub d'extracció

Amb tot lo esmentat abans es pot dir que, s'ha escollit la cristal·lització com a procés de purificació final degut a que es pot obtenir un producte d'una gran puresa en una sola etapa, es pot operar a temperatures baixes, i a més a més es un procés fàcil de controlar per que es produeixin cristalls uniformes que facilitin el seu empaquetatge i posterior emmagatzematge.

En contrapartida aquesta operació implica el maneig de sòlids amb els inconvenients tecnològics que això implica com es el ús de equips addicionals per retirar el solut restant de les aigües mares, tals com centrífugues i assecadors.

El tipus de cristal·litzador utilitzat en aquest projecte, per la formació de Carbaryl, serà el cristal·litzador continu evaporatiu de circulació forçada que treballa a una pressió igual a 0,16 bar i amb el qual es poden obtenir les mides dels cristalls desitjats.

Aquesta elecció s'ha basat principalment en que:

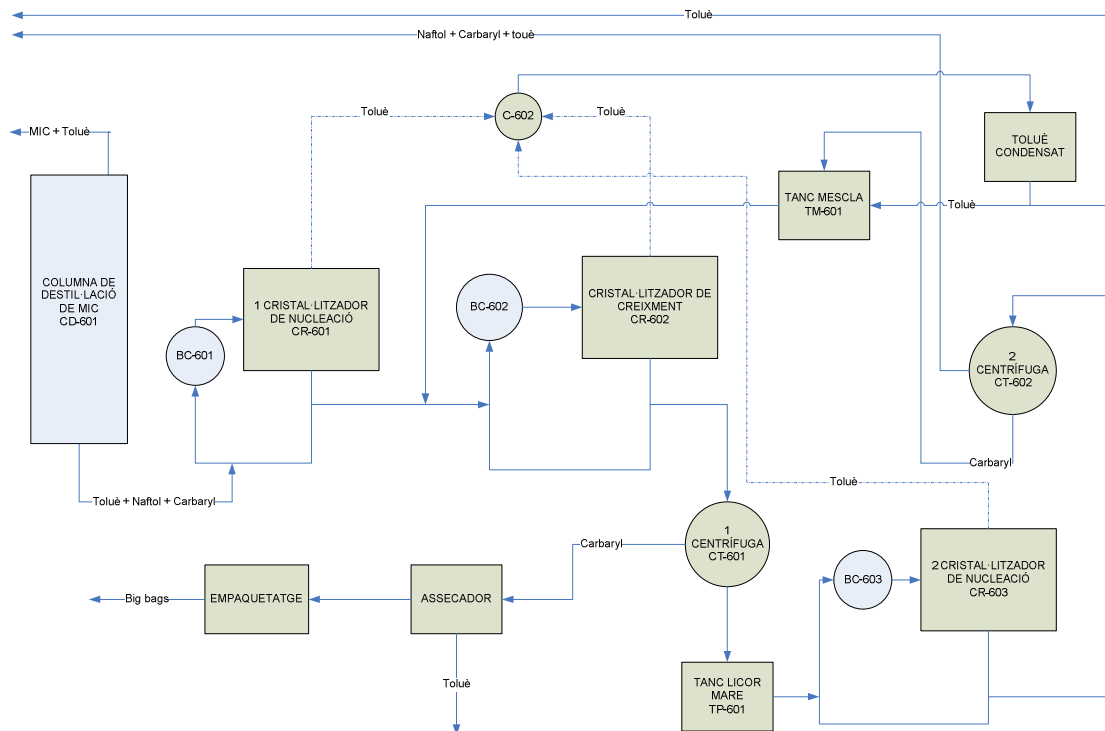
- Es necessitava un sistema amb una recirculació del fluid per afavorir la mescla, amb lo qual no faria falta agitació mecànica que podria ocasionar la ruptura dels cristalls formats.

- Tenint en compte que seria més desfavorable econòmicament tenir tancs de acumulació i bateries de cristal·lització, degut a la gran producció diària de CARBARYL, la cristal·lització continua suposa una gran millora per al procés.
- El principi d'aquesta cristal·lització es basa en aconseguir la temperatura suficient dins de l'equip per evaporar el toluè i d'aquesta manera aconseguir un producte més pur.

### 12.9.2 Sistema de purificació del Carbaryl

La producció de Carbaryl es un procés molt complex que consta de equips dissenyats específicament per als requeriments de la producció anual de la planta, per lo que la pèrdua, encara que sigui petita, de Carbaryl no es una opció viable. Per això s'ha fet una seqüència de separació del Carbaryl de la resta de substàncies que ens ajudi a obtenir un producte molt pur i definit.

El procés de separació del Carbaryl es més fàcil d'explicar si ens ajudem d'un diagrama de blocs, tal com es mostra a continuació.



**Figura 12.9.2.1** Diagrama de blocs del procés de purificació del Carbaryl



Per aquesta part del procés, i tenint en compte que el reactor R-501 de síntesi de Carbaryl no té una eficiència del 100%, s'ha dissenyat en primer lloc una columna de destil·lació, CD-601, per separar la totalitat del MIC de la corrent, el qual surt per caps juntament amb una part de toluè. Per altra banda, la corrent líquida de cues, serà la que passarà per un procés de purificació final per obtenir el producte desitjat.

La corrent esmentada es barreja amb la corrent de recirculació interna del primer cristal·litzador de nucleació, CR-601, que serà un 20% de la corrent de sortida del mateix, aquesta recirculació es fa per afavorir la sobresaturació dins del cos del cristal·litzador lo que permet augmentar el temps de residència dels cristalls per obtenir la mida desitjada, que en aquest cristal·litzador serà de 3 mm. Aquesta barreja es dirigeix a un bescanviador de calor per augmentar la temperatura de la solució 6 °C per sobre de la temperatura d'operació del cristal·litzador amb la finalitat de que part dels cristalls recirculats es dissolguin en el licor mare, quedant la solució saturada, afavorint la sobresaturació de la mescla dins del cristal·litzador i elevant la temperatura localment. Un cop escalfat s'introdueix axialment al cos del cristal·litzador el que permetrà la homogeneïtzació del magma dins del cristal·litzador.

En aquest primer cristal·litzador es treballarà a una temperatura de 65°C i a una pressió de 120 mmHg (0,16 bar), que s'assoleix gracies a una bomba de buit. S'ha escollit aquesta pressió degut a que volem una evaporació del toluè, sense augmentar la temperatura, amb la finalitat d'augmentar la solubilitat del Carbaryl.

Amb aquesta pressió el toluè té una temperatura d'ebullició de 59°C, tal com es pot comprovar a la següent equació de Antoine.

$$T = \frac{-B}{\log P - A} - C = \frac{-1343.94}{\log 120 - 6.91} - 219.38 = 59^{\circ}\text{C}$$

Per aportar el calor necessari per evaporar el toluè es dissenyarà un circuit d'oli per a l'escalfament de cada cristal·litzadors, el qual consta d'un circuit principal que es divideix en tres circuits de diferents cabals en funció del requeriment de cada equip, així a cada cristal·litzador arribarà el cabal de vapor necessari per a escalfar el cos del cristal·litzador amb un salt tèrmic de vapor determinat i un cop s'ha escalfat el cos del cristal·litzador s'agafa una part d'aquest cabal, que serà el necessari per a aportar la calor al bescanviador amb un salt tèrmic determinat, i es dirigirà cap al bescanviador.

La corrent de sortida del primer cristal·litzador, CR-601, es conduïda fins al segon cristal·litzador o primer cristal·litzador de creixement, CR-602, que juntament amb la sortida del tanc de mescla, TM-601, i la recirculació interna, també del 20 %, conformen la entrada a aquest cristal·litzador. Aquesta corrent passa per un bescanviador de calor que augmenta la temperatura 6°C per sobre la d'operació (65°C) i d'aquesta manera part dels cristalls es dissolen, afavorint així la saturació de la mescla dins del cristal·litzador, i a la vegada aportant calor. Aquest cristal·litzador treballa també a una pressió de buit de 0,16 bar que s'aconsegueix amb la mateixa bomba de buit que el CR-601 i la mida dels cristalls de Carbaryl a la sortida d'aquest cristal·litzador serà de 5mm de diàmetre.

Del segon cristal·litzador sortirà una mescla de cristalls dissolts en el licor mare, els quals s'han de separar per poder ser introduïts a un assecador. Amb aquesta finalitat s'utilitza un decantador centrífug on es separa el producte desitjat del licor mare, obtenint un corrent amb un 79% de sòlid que seguidament s'introdueix a un assecador que eliminarà el líquid restant donant lloc al producte final, aquest tindrà una puresa del 98% ja que el naftol que hi ha en el corrent líquid d'entrada queda en fase sòlida degut a la evaporació del dissolvent .

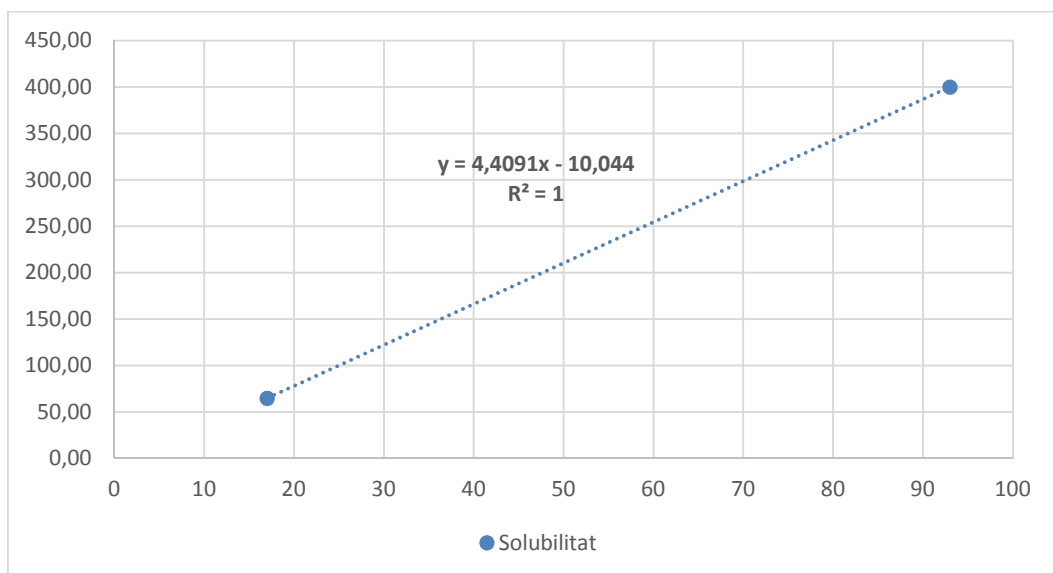
La sortida líquida provinent del decantador centrífug es enviada a el tanc pulmó TP-601 per després entrar al tercer cristal·litzador o segon cristal·litzador de nucleació, CR-603, el qual també treballarà a una temperatura de 65°C i a una pressió de 0,16 bar i tindrà una recirculació interna del 20%. Aquesta corrent, passarà també per un bescanviador de calor per pujar la temperatura 6°C per sobre la temperatura d'operació amb la mateixa finalitat que els altres dos cristal·litzadors. La corrent de sortida, passarà per un segon decantador centrífug on es separaran els cristalls formats. La sortida líquida es recircularà cap al reactor de síntesis de Carbaryl i els cristalls s'enviaran a un tanc de mescla on es barregen amb una quantitat de toluè justa per obtenir una mescla saturada, per a dissoldre els cristalls es reutilitza part del toluè evaporat dels cristal·litzadors una vegada s'ha condensat. Del tanc de mescla es recircula a l'entrada del cristal·litzador de creixement, on es barrejarà amb la recirculació interna del cristal·litzador i amb la corrent de sortida del primer cristal·litzador de nucleació. Amb aquesta recirculació s'afavoreix la sobresaturació de la mescla d'entrada al cristal·litzador.

### 12.9.3 Disseny cristal·litzadors

Una dada molt important pel disseny d'un cristal·litzador es la solubilitat del producte que es vol obtenir en el dissolvent on està diluït, per lo que s'ha buscat la solubilitat, a diferents temperatures, del Carbaryl en el toluè. Aquesta dada no ha estat trobada per lo que s'ha agafat la solubilitat del toluè en el xilè, component cíclic orgànic amb unes propietats semblants al toluè, a la temperatura de 25°C, sent aquesta igual a 100 g Carbaryl/Kg toluè. Cal esmentar que no s'han trobat més dades de solubilitat per lo que s'ha calculat la solubilitat del Carbaryl a la temperatura de sortida del reactor de síntesis del Carbaryl, R-501, tal com es pot veure a la següent equació:

$$\frac{\text{Kg Carbaryl}_{\text{sortida reactor R-501}}}{\text{Kg toluè}_{\text{sortida reactor R-501}}} = \frac{1482,05 \text{ Kg Carbaryl}}{4607,00 \text{ Kg Toluè}} \cdot \frac{1000 \text{ g}}{1 \text{ Kg}} = 321,7 \text{ g Carbaryl / Kg toluè}$$

Amb aquesta dada trobada s'ha suposat una solubilitat major, més conservativa per el disseny, agafant un valor de 400 gCarbaryl/Kg toluè, i s'ha fet una gràfica per calcular la equació de la recta i així trobar diferents solubilitat a diferents temperatures. A continuació es mostren la gràfica i una taula amb els valors de solubilitat a diferents temperatures.



**Figura 12.9.3.1** Solubilitat del Carbaryl en toluè per a diferents temperatures

Per al que fa al naftol, s'ha trobat que es molt soluble en toluè per el que es considera que no arriba a cristal·litzar, i per tant, es troba sempre dissolt en el licor mare.

Una vegada trobats aquests valors, s'han fet balanços de matèria per a cada cristal·litzador, en aquest cas tres.

## 12.9.4 Cristal·litzador de nucleació, CR-601

### 12.9.4.1 Balanç de matèria

S'ha utilitzat l'equació 12.9.3.1 que es l'equació per a un balanç de matèria general.

$$E + G = S + A \quad \text{Equació 12.9.4.1}$$

Tenint en compte que a la cristal·lització no hi ha generació ni acumulació de cristalls llavors s'ha reduït a la següent expressió:

$$E = S$$

On:

E = entrada

S = sortida

La entrada a aquest cristal·litzador es la sortida de cues de la columna de destil·lació CD-601, que es on es separa el MIC que no ha reaccionat en el reactor R-501, aquesta es barreja amb la recirculació interna que s'ha fixat a un 20% de la sortida del cos del cristal·litzador i s'introdueix al mateix.

A continuació es mostren els càlculs del balanç realitzat al cos del cristal·litzador on te lloc la formació dels cristalls i la evaporació del toluè.

El cabal d'entrada al cos del cristal·litzador CR-601 es calcula sumant el cabal que es recircula i el corrent de cues de la columna CD-601

$$Cabal\ màssic_{toluè} + Cabal\ màssic_{carbaryl} + Cabal\ màssic_{naftol}$$

$$(4607 + 1328,95 \cdot 0,2) + [1482,05 + (1483,14 + 367,22) \cdot 0,2] + (82,49 + 103,11 \cdot 0,2)$$

$$Cabal_{entrada} = 4582,57 + 1852,56 + 103,11 = 6538,24 \text{ Kg/h}$$

Pel que fa el terme de sortida, el primer que es fa es calcular la quantitat de toluè evaporat, aquesta determinarà la quantitat de cristalls formats, per arribar a assolir la producció desitjada. Aquest valor s'ha fixat en el 71%

$$4582,57 \frac{\text{Kg toluè}}{h} \cdot \frac{71}{100} = 3253,63 \text{ Kg toluè evaporat/h}$$

Una vegada calculat, s'ha trobat el cabal de sortida del toluè del licor mare.

$$4582,57 - 3253,63 = 1328,95 \text{ Kg toluè}_{LM}/h$$

Amb aquest cabal i tenint en compte la solubilitat del Carbaryl, a la temperatura d'operació del cristal·litzador, s'ha calculat el cabal de Carbaryl del licor mare.

$$\text{Cabala massic}_{\text{toluè}} \cdot \text{solubilitat Carbaryl}_{65^{\circ}\text{C}} = \text{Cabala massic}_{\text{Carbaryl LM}}$$

$$\frac{1328,95 \text{ Kg Toluè}}{h} \cdot \frac{277,30 \text{ g Carbaryl}}{\text{Kg toluè}} \cdot \frac{1 \text{ Kg Carbaryl}}{1000 \text{ g Carbaryl}} = 367,42 \frac{\text{Kg Carbaryl LM}}{h}$$

I restant-lo del cabal d'entrada s'han calculat els cristalls de Carbaryl format.

$$1852,56 - 367,42 = 1485,14 \text{ Kg Carbaryl}_{\text{cristall}}/h$$

Per al cas del naftol, com s'ha comentat anteriorment sempre es troba dissolt en el toluè, i per tant, entra i surt amb el licor mare.

El cabal total de sortida al cos del cristal·litzador és:

$$\begin{aligned} \text{Cabala}_{\text{sortida}} &= (3253,63 + 1328,95) + (1428,14 + 367,42) + 103,11 \\ &= 6538,24 \text{ Kg/h} \end{aligned}$$

A les taules 12.9.4.1 i 12.9.4.2 es recullen les corrents d'entrada i sortida del cos del cristal·litzador, així com les propietats del mateix.

**Taula 12.9.4.1** Propietats d'operació del cristal·litzador CR-601

<b>T entrada (°C)</b>	71
<b>T operació(°C)</b>	65
<b>P (bar)</b>	0,16
<b>Toluè evaporat (%)</b>	0,71
<b>Recirculació (%)</b>	0,2

**Taula 12.9.4.2** Cabals d'entrada i sortida del cos del cristal·litzador CR-601

	ENTRADA		SORTIDA	
	F (Kg/h)	V (Kg/h)	S (Kg/h)	LM (Kg/h)
<b>Toluè</b>	4582,57	3253,63	0,00	1328,95
<b>Carbaryl</b>	1852,56	0,00	1485,14	367,42
<b>Naftol</b>	103,11	0,00	0,00	103,11
<b>Total</b>	6538,24		6538,24	

On:

F= Corrent d'entrada al cos del cristal·litzador

V= Sortida vapor del cos del cristal·litzador

S= Sortida en fase sòlida del cos del cristal·litzador (Cristalls)

LM= Sortida en fase líquida del cos del cristal·litzador (Licor mare)

#### 12.9.4.2 Balanç d'energia

Juntament amb el balanç de matèria és imprescindible realitzar el balanç d'energia del cristal·litzador. La formació dels cristalls dintre del cristal·litzador estan directament relacionats amb la quantitat de toluè evaporat i les temperatures d'entrada i d'operació.

Com s'ha esmentat abans, el cristal·litzador consta de dos equips on es requereix bescanviar la calor, aquests son un bescanviador de calor i el cos del cristal·litzador, per lo que s'ha realitzat un balanç d'energia per cada un d'ells

**12.9.4.2.1 Balanç d'energia bescanviador**

La funció del bescanviador es disminuir la temperatura de la mescla entre el magma recirculat i el corrent de cues de la columna de destil·lació CD-601. Tot i que es necessita una temperatura d'entrada al cristal·litzador més alta que la d'operació, la temperatura a la que està el corrent inicialment abans de passar per el bescanviador és massa alta, ja que de no refredar-se, al entrar al cristal·litzador que opera a una pressió de 0,16 bar s'evaporaria molta més quantitat de toluè de la que es necessita, per això, la mescla es refreda des de els 112,5°C inicials a 71°.

El calor que caldrà remoure de la mescla serà:

$$Q = F \cdot C_{p_{mescla}} \cdot (T_1 - T_2) \quad \text{Equació 12.9.4.2}$$

On:

Q= calor a aportar (J/h)

F= cabal total (kg/h)

$C_{p_{mescla}}$ = calor específic d'ela mescla (J/kg)

$T_2$ = temperatura sortida del bescanviador (°C)

$T_1$ = temperatura entrada al bescanviador (°C)

Així doncs el calor que caldrà aportar serà:

$$Q = 6538,2 \cdot 2020 \cdot (112,5 - 71) = 5,48 \cdot 10^8 J/h = \mathbf{152,09 kW}$$

Un cop calculat el calor a bescanviar es calcula l'àrea mínima necessària amb l'equació:

$$A_{req} = \frac{Q}{U \cdot DTML} \quad \text{Equació 12.9.4.3}$$

On:

Q= calor a bescanviar (J/s)

$A_{req}$  = àrea de bescanvi de calor requerida. (m<sup>2</sup>)

U = coeficient de transferència de calor del sistema (W/m<sup>2</sup>·K). S'ha escollit tenint que s'escalfa un fluid orgànic amb oli tèrmic, 300 W/m<sup>2</sup>·K.

DTML = diferencial de temperatures mitjà logarítmic calculat com:

$$DTML = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}}$$

$$\Delta T_1 = T^{\circ}\text{sortida fluidde carcassa} - T^{\circ}\text{sortida fluiddetubs}$$

$$\Delta T_2 = T^{\circ}\text{sortida fluidde carcassa} - T^{\circ}\text{entrada fluiddetubs}$$

$$\Delta T_1 = 112,5 - 60 = 52,5$$

$$\Delta T_2 = 71 - 35 = 36$$

$$DTML = \frac{52,5 - 36}{\ln \frac{52,5}{36}} = \mathbf{43,73}$$

Amb aquests valors s'obté una àrea de bescanvi requerida de:

$$A_{req} = \frac{152090}{300 \cdot 43,73} = \mathbf{11,59 m^2}$$

El cabal d'oli necessari per aconseguir aquest bescanvi de calor, tenint en compte que la temperatura del oli d'entrada serà la de sortida del cos del cristal·litzador, es pot calcular amb l'equació següent:

$$m_{oli} = \frac{Q}{c_{p_{oli}} \cdot \Delta T} \quad \text{Equació 12.9.4.4}$$

on:

Q= calor a bescanviar (J/h)

$m_{oli}$  = cabal màssic d'oli tèrmic (kg/h)

$c_{p_{oli}}$  = capacitat calorífica de l'oli tèrmic (kJ/kg·K)

$\Delta T$  = salt tèrmic de l'oli tèrmic entre l'entrada i la sortida (°C). El salt tèrmic de l'oli tèrmic és fixa a 10°C

$$m_{oli} = \frac{5,48 \cdot 10^8}{2050 \cdot 25} = \mathbf{10692,68 kg/h}$$



12.9.4.2.2 Balanç d'energia cos cristal·litzador

El balanç d'energia per al cos del cristal·litzador es calcula amb la següent equació:

$$Q = V \cdot \lambda_{vap} + S \cdot \lambda_{crist} - F \cdot Cp_F \cdot (T_1 - T_2) \quad \text{Equació 12.9.4.5}$$

on:

Q= calor a bescanviar (J/h)

V= cabal de vapor (kg/h)

$\lambda_{vap}$ = calor de vaporització del toluè (J/kg)

S= cristalls formats (kg/h)

$\lambda_{crist}$ =calor de cristal·lització del Carbaryl (J/kg), [*Ground wàter Chemicals Desk Reference, Fourth Edition* (pag 200)]

F= cabal total d'entrada (kg/h)

$Cp_F$ = calor específic de la mescla d'entrada (J/kg)

$T_1$ = temperatura entrada al cristal·litzador (°C)

$T_2$ = temperatura d'operació (°C)

$$Q = 3253,63 \cdot 3,92 \cdot 10^5 + 1485,14 \cdot -1,2 \cdot 10^5 - 6538,24 \cdot 1301,59 \\ \cdot (71 - 65) = 1,10 \cdot 10^9 J/h = \mathbf{290,80 kW}$$

Un cop calculat el calor a bescanviar es calcula l'àrea mínima necessària amb l'equació:

$$A_{req} = \frac{Q}{U \cdot DTML} \quad \text{Equació 12.9.4.6}$$

on:

Q= calor a bescanviar (J/s)

$A_{req}$  = àrea de bescanvi de calor requerida. (m<sup>2</sup>)

U = coeficient de transferència de calor del sistema (W/m<sup>2</sup>·K). S'ha escollit tenint en compte que s'escalfa un fluid orgànic amb oli tèrmic, 300 W/m<sup>2</sup>·K.

DTML = diferencial de temperatures mitjà logarítmic calculat com:

$$DTML = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}}$$

$$\Delta T_1 = T^{\circ}\text{entrada vapor} - T^{\circ}\text{sortidamagma}$$

$$\Delta T_2 = T^{\circ}\text{sortida vapor} - T^{\circ}\text{entradamagma}$$

$$\Delta T_1 = 150 - 65 = 79$$

$$\Delta T_2 = 140 - 71 = 75$$

$$DTML = \frac{79 - 75}{\ln \frac{79}{75}} = 76,98$$

Amb aquests valors s'obté una àrea de bescanvi requerida de:

$$A_{req} = \frac{2,9 \cdot 10^5}{300 \cdot 47,55} = 12,59m^2$$

El cabal d'oli necessari es calcula amb la següent equació:

$$m_{oli} = \frac{Q}{c_{p_{oli}} \cdot \Delta T} \quad \text{Equació 12.9.4.7}$$

on:

Q= calor a bescanviar (J/h)

$m_{oli}$  = cabal màssic de oli tèrmic (kg/h)

$c_{p_{oli}}$  = capacitat calorífica del oli tèrmic (kJ/kg·K)

$\Delta T$  = salt tèrmic de l'oli tèrmic entre l'entrada i la sortida (°C). Es fixa a 10°C

$$m_{oli} = \frac{1,05 \cdot 10^9}{2050 \cdot 10} = 51066,61 \text{ kg/h}$$

### 12.9.4.3 Disseny funcional

#### 12.9.4.3.1 Dimensionament de l'equip

El volum del cristal·litzador ve donat per el cabal a tractar, que es conegut, i el temps necessari per a assolir una mida determinada dels cristalls. Un terme molt important

per a el càlcul del temps de cristal·lització es la velocitat de creixement dels cristalls, aquest valor no es conegut i per tant s'utilitzarà un valor típic igual a  $10^{-7}$  m/s.

En aquest cas s'ha decidit que la mida del cristall a formar sigui igual a 3 mm de diàmetre, per lo que s'ha decidit utilitzar cristal·litzadors del tipus Oslo els quals permeten una mida fins a 6 mm de diàmetre [<http://www.gea-messo-pt.com>].

L'equació per a calcular el temps de cristal·lització es la següent:

$$\tau = \frac{L}{3,67 \cdot G} \quad \text{Equació 12.9.4.8}$$

on:

$\tau$  = temps de cristal·lització (h)

L= longitud del cristall (m)

G= velocitat de creixement (m/s)

Per obtenir una mida del cristall de 3 mm el temps de cristal·lització és:

$$\tau = \frac{0,003 \text{ m}}{3,67 \cdot 10^{-7} \text{ m/h}} = \mathbf{2,78h}$$

Tal com es pot observar, el temps de residència està dins dels límits de temps establert per a un cristal·litzador d'aquestes característiques, entre 2 i 6 hores.

Així doncs el volum del líquid al cristal·litzador es calcula com es mostra a continuació:

$$V = Q \cdot \tau \quad \text{Equació 12.9.4.9}$$

on:

V=volum (m<sup>3</sup>)

Q = cabal volumètric (m<sup>3</sup>/h)

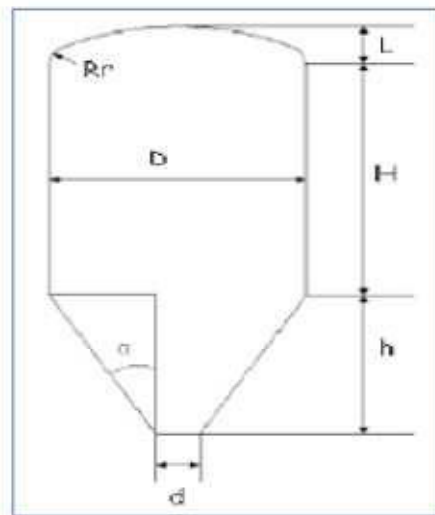
$\tau$ = temps de cristal·lització (h)

$$V = 6,91 \cdot 2,78 = \mathbf{19,19m^3}$$

Es fa un sobredimensionament del volum del 25%.

$$V_{\text{sobredimensionat}} = 19,19 \cdot 1,25 = \mathbf{23,99 m^3}$$

Tenint aquest volum sobredimensionat, es realitza un dimensionament del cristal·litzador tenint en compte que ha de disposar d'un fons cònic per afavorir la sortida del magma, per la part inferior, ja que aquest té una alta concentració de sòlids. Aquestes dimensions tenen com a restriccions inicials que l'alçada del fons cònic sigui igual a 1/3 de l'alçada del líquid a la part cilíndrica i que l'alçada del líquid de la part cilíndrica sigui igual al diàmetre del cristal·litzador. Amb tot això i les equacions descrites a continuació s'aplica un "solver", variant l'alçada del líquid del cilindre per que la suma dels volums de líquid de la part cònica i la part cilíndrica sigui igual al volum de líquid sobredimensionat del reactor, obtenint una alçada de 3 m.



**Figura 12.9.4.2** Esquema de les dimensions del cristal·litzador dissenyat

Per calcular el volum del líquid al cilindre:

$$V_{\text{líquid cilindre}} = \pi \cdot \left(\frac{D}{2}\right)^2 \cdot H \quad \text{Equació 12.9.4.10}$$

$$V_{\text{líquid cilindre}} = \pi \cdot \left(\frac{3,0}{2}\right)^2 \cdot 3,0 = \mathbf{21,08 \text{ m}^3}$$

on:

D = diàmetre del cilindre

H = alçada del cilindre

Tenint en compte que aquest volum només té en compte el líquid que hi haurà al cristal·litzador, es fa un sobredimensionat de l'alçada del líquid perquè hi càpiguen els gasos evaporats, d'un 20 %, obtenint un valor de 3,59 m, a més a més i tenint en compte que és econòmicament més viable utilitzar una alçada normalitzada s'ha

decidit que l'alçada final del cilindre sigui igual a 4 m. Amb això es calcularà el volum del cilindre:

$$V_{cilindre} = \pi \cdot \left(\frac{3,0}{2}\right)^2 \cdot 4,0 = \mathbf{28,17 m^3}$$

Per calcular el volum del tronc cònic

$$V_{tronc\ cònic} = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot h \cdot \left(\frac{D^2}{4} + \frac{d^2}{4} + \frac{D \cdot d}{4}\right) \quad \text{Equació 12.9.4.11}$$

$$V_{tronc\ cònic} = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot 1,0 \cdot \left(\frac{3,0^2}{4} + \frac{0,6^2}{4} + \frac{3,0 \cdot 0,6}{4}\right) = \mathbf{2,91 m^3}$$

on:

d = diàmetre del fons cònic

h = alçada del tronc cònic. Calculat com:

$$h = \frac{D-d/2}{\tan(\alpha)} \quad \text{Equació 12.9.4.12}$$

on:

$\alpha = 30^\circ$

$$h = \frac{3 - 0,6/2}{\tan(30)} = \mathbf{1,0 m}$$

Obtenint un volum final igual a:

$$V_{final} = V_{cilindre} + V_{tronc\ cònic} = 28 + 2,88 = \mathbf{31,07 m^3}$$

#### 12.9.4.3.2 Disseny mitja canya

Per a realitzar el bescanvi de calor dels cristal·litzadors s'ha escollit aquest mètode de escalfament degut a que la instal·lació de un serpentí a l'interior del cristal·litzador podria provocar incrustacions no desitjades que portarien al mal funcionament de l'equip. Per la mitja canya haurà de circular el cabal d'oli tèrmic calculat anteriorment en el balanç d'energia. Les velocitats típiques de líquid per l'interior de la mitja canya estan entre 2 i 5 m/s per assegurar que el coeficient de transferència de matèria no es veu afectat degut a una velocitat molt baixa i que les pèrdues de carrega no seran molt elevades degut a una velocitat molt alta. Així doncs caldrà calcular el diàmetre intern de la mitja canya per treballar amb una velocitat del oli tèrmic de 3 m/s.

$$v_{oli} = \frac{m_{oli}/\rho_{oli}}{\text{Àrea de pas}} = \frac{m_{oli}/\rho_{oli}}{\frac{(\pi \cdot D_i^2)}{4}} \quad \text{Equació 12.9.4.13}$$

Aïllant el diàmetre de l'equació queda:

$$D_i = \sqrt{\frac{m_{oli}/\rho_{oli} \cdot 4 \cdot 2}{\pi \cdot v_{oli}}} \quad \text{Equació 12.9.4.14}$$

on:

$v$ = velocitat oli tèrmic (m/s). Es fixa a 3 m/s

$m_{oli}$ = cabal màssic oli tèrmic (kg/s)

$\rho_{oli}$ = densitat oli tèrmic (kg/m<sup>3</sup>)

$D_i$ = diàmetre intern mitja canya (m)

$$D_i = \sqrt{\frac{14,19/835 \cdot 8}{\pi \cdot 3}} = 0,119$$

S'utilitzarà una mitja canya d'un diàmetre intern de 0,12 m.

La longitud requerida de la mitja canya amb el diàmetre escollit, considerant que es sobredimensiona un 25% l'àrea de bescanvi mínima requerida, es calcula amb l'equació següent:

$$L = \frac{A_{req} \cdot 1,25}{D_i} \quad \text{Equació 12.9.4.15}$$

on:

$A_{req}$ = Àrea de bescanvi mínima requerida (m<sup>2</sup>)

$D_i$  = Diàmetre intern mitja canya (m)

$$L = \frac{12,59 \cdot 1,25}{0,12} = 131,16 \text{ m}$$

El numero de voltes vindrà donat per el diàmetre del cristal·litzador i es calcula com es mostra a continuació:

$$n^{\circ} \text{ voltes} = \frac{L}{\pi \cdot D} \quad \text{Equació 12.9.4.16}$$

on:

$L$ = longitud de la mitja canya (m)

$D$ = diàmetre del cilindre (m)

$$n^{\circ} \text{ voltes} = \frac{131,16}{\pi \cdot 2,99} = 13,94 \approx \mathbf{14 \text{ voltes}}$$

Per tal de que la mitja canya ocupi tota la altura del líquid en el cilindre (H) es deixa un espai entre voltes, aquest espai es calcula amb l'equació següent:

$$\text{espai entre voltes} = \frac{H - (D_e \cdot n^{\circ} \text{ voltes})}{n^{\circ} \text{ voltes}} \quad \text{Equació 12.9.4.17}$$

on:

H= Alçada del líquid (m)

$D_e$  = Diemetre extern, considerant un gruix de la chapa de 1,5 mm

$$\text{espai entre voltes} = \frac{2,99 - (0,123 \cdot 14)}{14} = \mathbf{0,0825}$$

Per evitar que la mitja canya quedi per sobre del nivell del líquid en el cas que aquest disminueixi, es deixarà un espai de 0,08 m entre cada volta.

#### 12.9.4.4 Disseny mecànic

Pel càlcul del disseny mecànic dels cristal·litzador, s'ha utilitzat la Norma inclosa en la Secció VIII Divisió 1 "Pressure Vessels" del Codi ASME (*American Society of Mechanical Engineers*) que inclou el disseny, la selecció dels materials, la fabricació, la inspecció, les proves, els criteris de aprovació i la documentació resultant de les diferents etapes a complir.

El criteri de disseny utilitzat per aquesta secció establert que el gruix de paret d'un recipient a pressió haurà de ser tal que les tensions generades per les pressions no hauran d'excedir el valor de la tensió admissible del material. Amb algunes excepcions, l'espessor mínim permès per a cos i capçals independentment de la forma es 1,5 mm excloent l'espessor per corrosió.

Els recipients seran dissenyats per les condicions més severes de pressió i temperatura previstes per les condicions normals d'operació requerides. Es realitza el càlcul de l'espessor de cada part del cristal·litzador per a pressió interna i per a pressió externa i d'entre els dos el valor més gran serà el necessari per a la seva construcció.

Els paràmetres de disseny són:

- Pressió de disseny interna (P): La pressió de disseny serà la que s'utilitzarà a les equacions per al càlcul de les parts constitutives dels recipients sotmès a pressió. Aquesta pressió es pot determinar mitjançant l'equació 12.9.4.18 on es calcularan dos pressions, partint de la pressió d'operació, i s'agafarà la més gran per motius de seguretat. En aquesta cas a més a més se li sumarà la pressió hidrostàtica, que es calcula segons l'equació 12.9.4.19, coneixent la densitat de la mescla a la temperatura d'operació i l'alçada del líquid.

$$Pressió\ de\ disseny\ interna = \max(1,1 \cdot P.\ operació, P.\ operació + 2atm) + \Delta P$$

**Equació 12.9.4.18**

$$\Delta P = \rho \cdot g \cdot h \quad \text{Equació 12.9.4.19}$$

- Pressió de disseny externa (Pe): Degut a que els cristal·litzadors treballen a una pressió interna inferior a la pressió atmosfèrica caldrà calcular l'espessor requerit per aguantar la pressió atmosfèrica considerant que l'equip treballa al buit absolut, així doncs, la pressió externa de disseny serà de 15 psi per a tots els cristal·litzadors.
- Temperatura de disseny (T): Seguint els mateixos criteris que per a la pressió, es calcula la temperatura de disseny sumant-li a la temperatura d'operació 20°C per motius de seguretat.

$$Temperatura\ de\ disseny = T_{operació} + 20^{\circ}C$$

- Esforz de disseny de la tensió (S): Es el valor màxim al que podem sotmetre un material que forma part d'un recipient a pressió en condicions normals d'operació. El seu valor es aproximadament el 25% del esforç últim a la tensió del material en qüestió, que variarà en funció del material i la temperatura, tal com es mostra a la taula 12.9.4.3.



**Taula 12.9.4.3** Esforç de tensió.

VALORES MAXIMOS DE ESFUERZO PERMITIDO, 1 000 lb/pulg <sup>2</sup>													
MATERIALES DE LA TABLA	PARA TEMPERATURAS DEL METAL NO MAYORES DE, GRADOS F												NOTAS
	-20-100	200	300	400	500	600	650	700	750	800	850	900	
<b>1</b>	18.8	17.8	16.6	16.2	15.9	15.9	15.9	15.5	15.2	14.9	14.7	1	
	18.8	15.7	14.1	12.9	12.1	11.4	11.2	11.1	10.8	10.6	10.4	10.2	
<b>2</b>	15.7	15.7	15.3	14.7	14.4	14.0	13.7	13.5	13.3	13.0	—	—	1
	15.7	13.4	12.0	11.0	10.3	9.7	9.5	9.4	9.2	9.1	—	—	
<b>3</b>	18.8	18.8	18.4	18.1	18.0	17.0	16.7	16.3	16.1	15.9	15.7	15.5	1
	18.8	16.2	14.6	13.4	12.5	11.8	11.6	11.3	11.2	11.0	10.9	10.8	
<b>4</b>	15.7	15.7	15.7	15.5	14.4	13.5	13.2	12.9	12.6	12.4	12.1	—	1
	15.7	13.3	11.9	10.8	10.0	9.4	9.2	9.0	8.8	8.6	8.4	—	
MATERIALES DE LA TABLA	PARA TEMPERATURAS DEL METAL NO MAYORES DE, GRADOS F												
	950	1000	1050	1100	1150	1200	1250	1300	1350	1400	1450	1500	
<b>1</b>	14.4	13.8	12.2	9.8	7.7	6.1	4.7	3.7	2.9	2.3	1.8	1.4	1
	10.0	9.8	9.5	8.9	7.7	6.1	4.7	3.7	2.9	2.3	1.8	1.4	
<b>3</b>	15.4	15.3	14.5	12.4	9.8	7.4	5.5	4.1	3.1	2.3	1.7	1.3	1
	10.7	10.6	10.5	10.3	9.3	7.4	5.5	4.1	3.1	2.3	1.7	1.2	

- Eficiència de les soldadures (E): Generalment els equips consten de varies lamines unides per soldadura. Es pot definir la eficiència de les soldadures com el grau de confiabilitat que es pot tindre d'elles. A la taula 12.9.4.4 es mostren les eficiències de cada tipus de soldadura segons el radiografiat.

**Taula 12.9.4.4** Eficiencia de les soldadures

Tipo de soldadura	Grado de examen radiográfico		
	100 %	Puntual	No
Soldadura en "X"	1.00	0.85	0.70
Soldadura en "V" con fondo	0.90	0.80	0.65
Soldadura en "V" sin fondo	--	--	0.60

- Sobreesspessor per corrosió (C<sub>1</sub>): Es el sobreesspessor suficient, que es preveu, per a tota la vida útil planificada para recipients sotmesos a pèrdues d'esspessor per corrosió, erosió o abrasió mecànica. Aquest sobreesspessor no sempre te que ser igual en tot el recipient, el gruix pot augmentar dependent de les zones més propenses.
- Factor M: El factor M es un factor adimensional que s'aplica a les tapes toriesfèriques dels recipients i es defineix com la relació entre el radi esfèric interior, L, i el radi intern, r.

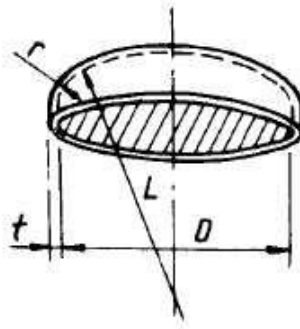


Figura 12.9.4.3 Esquema del capçal toriesfèric

Una vegada estipulada la relació entre L i r, s'extreu el valor de M de la taula 12.9.4.5.

Taula 12.9.4.5 Valor de M en funció de la relació L/r

VALORES DEL FACTOR "M"																	
L/r	1.00	1.25	1.50	1.75	2.00	2.25	2.50	2.75	3.00	3.25	3.50	4.00	4.50	5.00	5.50	6.00	6.50
M	1.00	1.03	1.06	1.08	1.10	1.13	1.15	1.17	1.18	1.20	1.22	1.25	1.28	1.31	1.34	1.36	1.39
L/r	7.00	7.50	8.00	8.50	9.00	9.50	10.0	10.5	11.0	11.5	12.0	13.0	14.0	15.0	16.0	16.5	*
M	1.41	1.44	1.46	1.48	1.50	1.52	1.54	1.56	1.58	1.60	1.62	1.65	1.69	1.72	1.75	1.77	
* LA MAXIMA RAZON PERMITIDA ES: L = D + 2t (véase la nota 2 de la página opuesta)																	

#### 12.9.4.4.1 Càlcul d'espessors

Aquest càlcul dependrà de la forma del recipient que es vol dissenyar, per al cas dels cristal·litzadors es dissenyaran recipients cilíndrics i recipients cònics.

##### 12.9.4.4.1.1 Cos cilíndric

###### Disseny a pressió interna

$$t = \frac{P \cdot R}{S \cdot E - 0,6 \cdot P} + C.A. \quad \text{Equació 12.9.4.20}$$

on:

t= espessor de la paret (mm)

P= pressió de disseny o pressió màxima de treball permesa (bar)

S= valor esforç del material (bar)

E= eficiència de la junta

R= radi interior (mm)

C.A.= sobreessor (mm)

El sobreessor per corrosió del material és de 0,508 mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobreessor serà 7,62 mm.

$$t = \frac{2,44 \cdot 1492,56}{1082,46 \cdot 0,85 - 0,6 \cdot 2,44} = 3,96 + 7,62 = \mathbf{11,58\ mm}$$

Per calcular la t comercial aquest valor s'arrodonirà al primer gruix de xapa comercial superior.

$$t_{comercial} = \mathbf{12\ mm}$$

### Disseny a pressió externa

Com que l'equip treballa al buit caldrà assegurar-se que la xapa té el gruix suficient per a suportar la pressió externa, per això es calcula la pressió externa màxima amb la següent equació:

$$P_{e,max} = \frac{4 \cdot B}{3 \cdot D_0/t} \quad \text{Equació 12.9.4.21}$$

on:

$P_{e,max}$  = Pressió externa màxima permesa (psi).

B=Factor B. Es calcula gràficament.

$D_0$  = Diàmetre exterior (mm)

t = Espessor de la xapa (mm)

Primer de tot cal suposar un gruix per a la xapa, en aquest cas, el gruix calculat en el disseny a pressió interna no es suficient per a aguantar la pressió externa, a continuació es mostren els càlculs per a el gruix de xapa mínim per a que la pressió externa màxima permesa sigui superior a la màxima de disseny (15 psi)

El valor de t utilitzat serà el gruix de la xapa nova menys el gruix afegit per corrosió ja que d'aquesta manera ens assegurem que en el pitjor dels casos, quan s'ha oxidat el màxim calculat, la xapa pugui aguantar la pressió.

$$t = t_{nova} - CA1 = 20 - 7,62 = \mathbf{12,38\ mm}$$

Per al càlcul del factor B es segueix el procediment següent:

1. Es determina el valor de les relacions  $L/D_0$  i  $D_0/t$
2. S'agafa el valor de  $L/D_0$  (1,32) i amb la figura 12.9.4.4 es segueix horitzontalment fins la línia del gràfic amb el valor de  $D_0/t$  (244) . Des de el punt d'intersecció es segueix verticalment per a determinar el factor A.

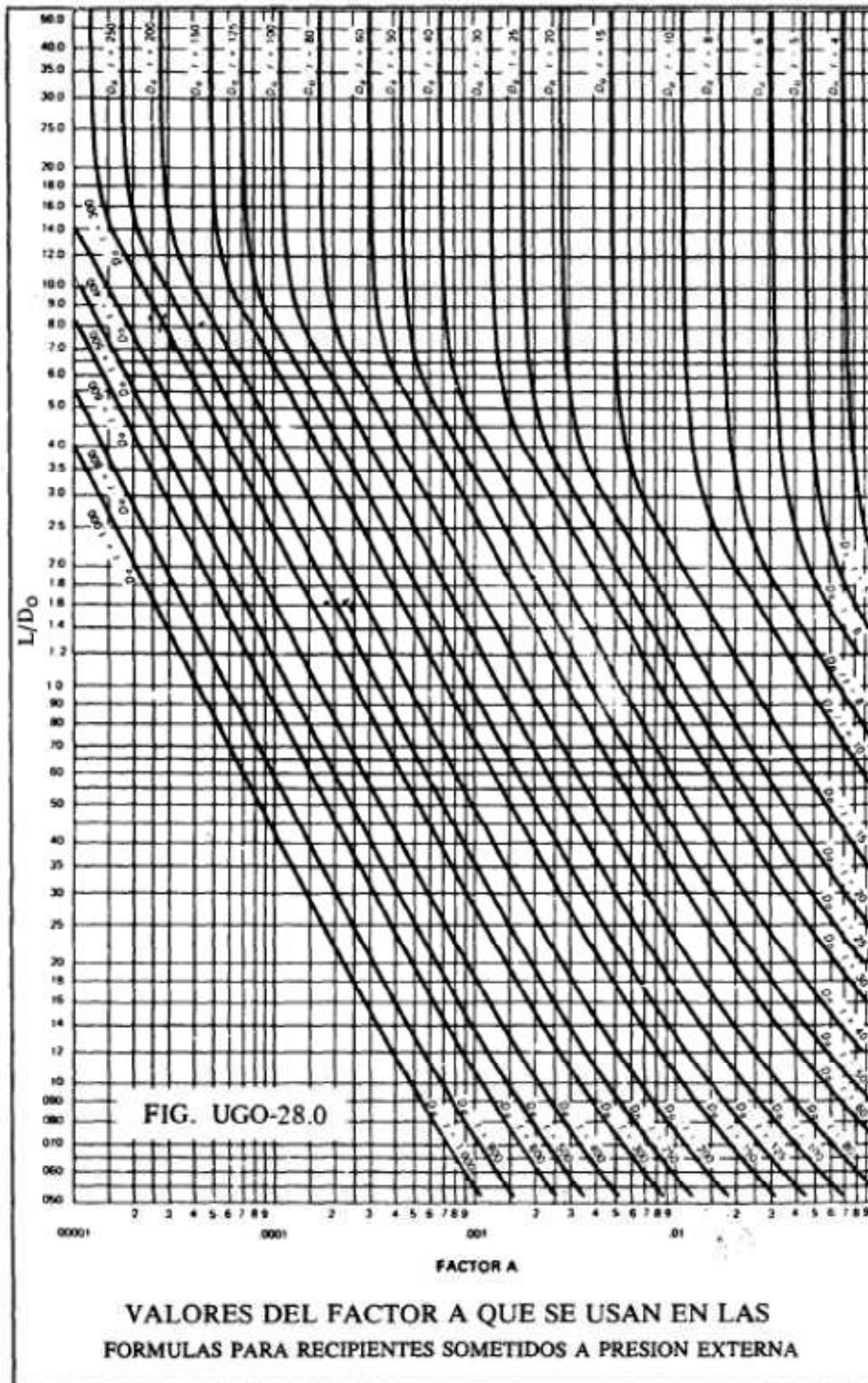
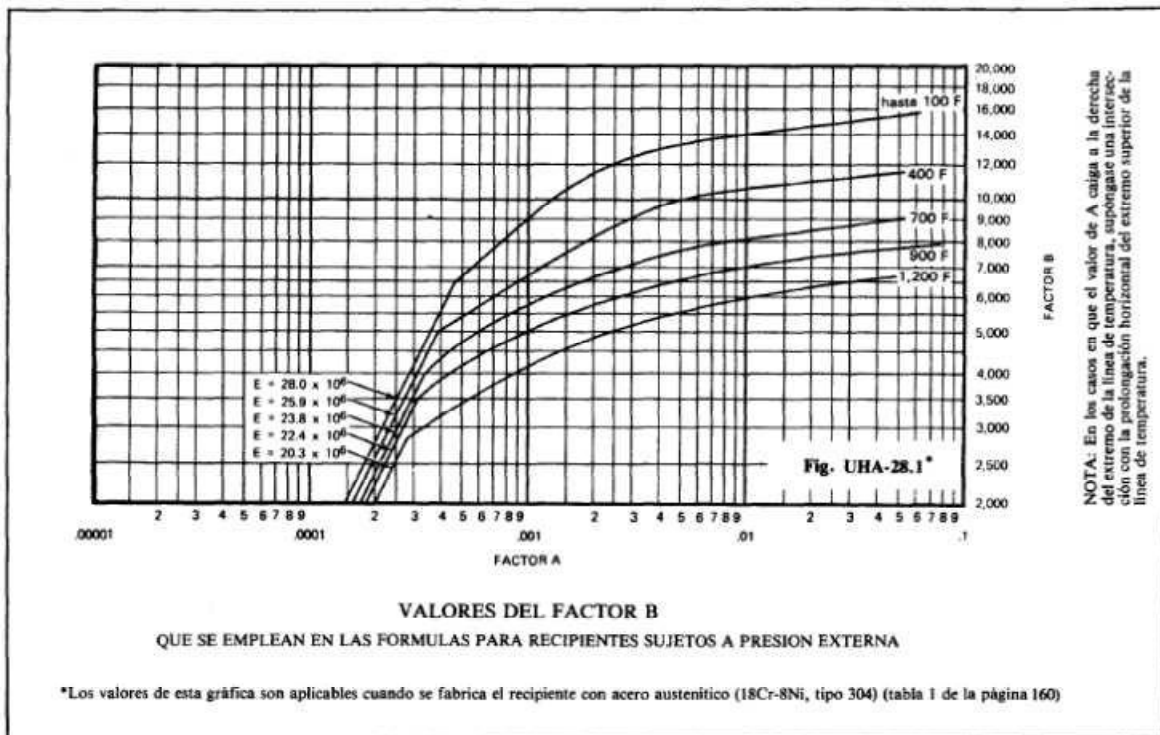


Figura 12.9.4.4 Figura utilitzada per a determinar el valor del factor A.

El valor obtingut del factor A es de 0,00025.

3. A la figura 12.9.4.5 s'agafa el valor del factor A i es segueix verticalment fins la línia de temperatura de disseny (185°F) , des de la intersecció es segueix horitzontalment fins a trobar el valor del factor B.



**Figura 12.9.4.5** Figura utilitzada per a determinar el valor del factor B.

El valor obtingut gràficament del factor B es de 3300.

Així doncs la pressió màxima permesa serà:

$$P_{e.max} = \frac{4 \cdot 3300}{3 \cdot 243} = 18,07 \text{ psi} = \mathbf{1,25 \text{ bar}}$$

Com que la pressió màxima permesa és superior a la pressió de disseny (15 psi) el gruix indicat per al tronc cònic es de 20 mm.

Amb aquest gruix trobem una pressió màxima interna d'operació amb la següent equació:

$$P = \frac{S \cdot E \cdot t}{R + 0,6 \cdot t} \quad \text{Equació 12.9.4.22}$$

on:

t= espessor de la paret (mm)

P= pressió de disseny o pressió màxima de treball permesa (bar)

E= eficiència de la junta

R= radi interior (mm)

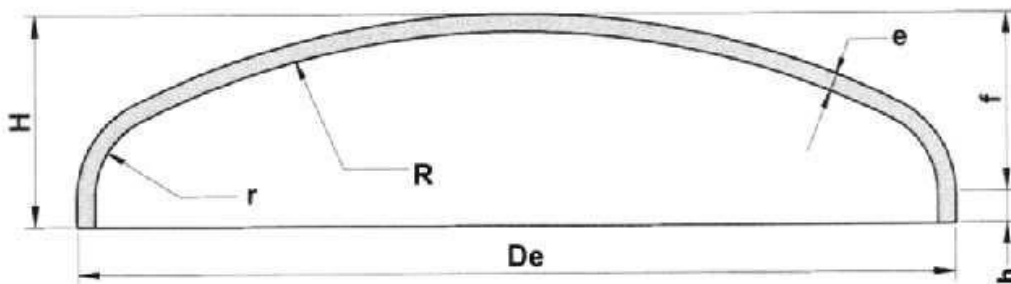
S= valor del esforç del material (bar)

$$P = \frac{1082,46 \cdot 0,85 \cdot 20}{1492,56 + 0,6 \cdot 20} = 12,23 \text{ bar}$$

#### 12.9.4.4.1.2 Capçal toriesfèric

##### Disseny a pressió interna

Els tipus de capçals més utilitzats són el toriesfèric, l'hemisfèric i l'el·lipsoïdal, en aquest cas s'utilitza el toriesfèric ja que és el més comú en la indústria química.



**Figura 12.9.3.6** Esquema de les dimensions d'un capçal tipus toriesfèric.

Aquest capçal ve definit pel radi de la corona (L) i el radi del colze (r) que es calculen respecte al diàmetre intern de la carcassa:

$$L = D = 2985,11 \text{ mm}$$

$$r = 0,1 \cdot D = 298,51 \text{ mm}$$

$$\frac{L}{r} = 10$$

Per una relació R/r menor de 16,67 l'espessor es calcula amb l'expressió següent:

$$t_f = \frac{P \cdot L \cdot M}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad \text{Equació 12.9.4.23}$$

on:

$t_f$  = espessor del capçal (mm)

P = pressió de disseny del recipient (bar)

M = factor que depèn de la relació R/r, en aquest cas igual a 1,54

E = factor de soldadura (radiografiat doble parcial)

S = càrrega admissible del material (bar)

$C_1$  = marge per corrosió (mm)

$C_2$  = tolerància de fabricació (mm)

$$t_f = \frac{2,44 \cdot 2985,11 \cdot 1,54}{2 \cdot 1082,46 \cdot 0,82 - 0,2 \cdot 2,44} + 7,62 + 0,61 = 14,32 \text{ mm}$$

Finalment el valor de l'espessor dels capçals, evitant costos de fabricació específics:

$$\text{espessor dels capçals} = 15 \text{ mm}$$

### Disseny a pressió externa

Com que l'equip treballa al buit caldrà assegurar-se que la xapa té el gruix suficient per a suportar la pressió externa, per això es calcula la pressió externa màxima amb la següent equació:

$$P_{e,max} = \frac{B}{L_0/t} \text{ Equació 12.9.4.24}$$

on:

$P_{e,max}$  = Pressió externa màxima permesa (psi)

B=Factor B. Es calcula gràficament.

$L_0$  = Radi exterior de la peça (mm)

t= Espessor de la xapa (mm)

Primer de tot cal suposar un gruix per a la xapa, en aquest cas, el gruix calculat en el disseny a pressió interna no és suficient per a aguantar la pressió externa, a continuació es mostren els càlculs per a el gruix de xapa mínim per a que la pressió externa màxima permesa sigui superior a la màxima de disseny (15 psi)

$$t = t_{nova} - CA1 - CA2 = 20 - 7,62 - 0,611 = 11,77 \text{ mm}$$



on:

$t_{nova}$  = espessor de la xapa comercial (mm)

CA1= gruix per corrosió (mm)

CA2= tolerància per la curvatura de la peça (mm)

Per al càlcul del factor B es segueix el procediment següent:

4. Calcular el valor de A amb l'equació següent:

$$A = \frac{0,125}{L_0/t} \quad \text{Equació 12.9.4.25}$$

on:

$L_0$  = Radi exterior de la peça (2994,29 mm)

A= factor A

t= gruix de la xapa (mm)

$$A = \frac{0,125}{117,52/0,463} = 0,0005$$

5. A la figura 12.9.4.4 s'agafa el valor del factor A i es segueix verticalment fins la línia de temperatura de disseny (185°F) , des de la intersecció es segueix horitzontalment fins a trobar el valor del factor B. En aquest cas el valor obtingut de B és de 6250.

Així doncs la pressió externa màxima permesa és:

$$P_{e.max} = \frac{6250}{2994,29/11,769} = 24,565 \text{ psi} = \mathbf{1,69 \text{ bar}}$$

La pressió externa màxima permesa és superior a la pressió externa de disseny, per tant, el gruix de la xapa ha de ser de 20 mm.

Amb aquest gruix trobem una pressió màxima interna d'operació amb la següent equació

$$P = \frac{2 \cdot S \cdot E \cdot t}{L \cdot M + 0,2 \cdot t} \quad \text{Equació 12.9.4.26}$$

on:

t= espessor de la paret (mm)

P= pressió de disseny o pressió màxima de treball permesa (bar)

E= eficiència de la junta

L= radi interior del casquet (mm)

M= factor adimensional

S= valor del esforç del material (bar)

$$P = \frac{2 \cdot 1082,46 \cdot 0,85 \cdot 20}{2985,11 \cdot 1,54 + 0,2 \cdot 20} = \mathbf{12,31 \text{ bar}}$$

#### 12.9.4.4.1.3 Secció cònica

##### Disseny a pressió interna

$$t = \frac{P \cdot D}{2 \cdot \cos \alpha \cdot (S \cdot E - 0,6 \cdot P)} + C.A. \quad \text{Equació 12.4.3.27}$$

on:

t= espessor de la paret (mm)

P= pressió de disseny o pressió màxima de treball permesa (bar)

S= valor esforç del material (bar)

E= eficiència de la junta

D= diàmetre interior (mm)

$\alpha$ = la meitat del angle en el vèrtex(graus)

C.A.= sobreessessor (mm)

$$t = \frac{2,53 \cdot 2985,11}{2 \cdot \cos 30 \cdot (1082,46 \cdot 0,85 - 0,6 \cdot 2,53)} = 4,75 + 7,62 = 12,37 \text{ mm}$$

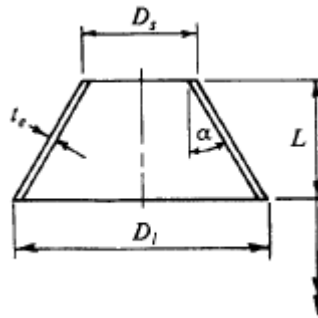
Per calcular la t comercial aquest valor s'arrodonirà al primer gruix de xapa comercial superior.

$$t_{\text{comercial}} = \mathbf{15 \text{ mm}}$$

Disseny a pressió externa

Com que l'equip treballarà al buit cal comprovar que el gruix calculat per a pressió interna serà suficient per a aguantar la pressió externa de disseny que serà igual a la pressió atmosfèrica (15 psi).

A la figura 12.9.4.7 es mostra la notació que s'utilitzarà per a definir les mides del fons cònic i que s'utilitzaran a les formules.



**Figura 12.9.4.7** Notació utilitzada per a les mides del fons cònic

$D_s$ = Diàmetre exterior a l'extrem petit ( 613,62mm)

$D_l$ = Diàmetre exterior a l'extrem gran (3009,05mm)

$L$ = Longitud del con (998,10 mm)

$\alpha$ = La mitat de l'angle al vèrtex ( $30^\circ$ )

$t_e$ = Espessor efectiu de la xapa (mm).  $t_e = t \cdot \cos \alpha$

La pressió externa màxima permesa es calcula de la següent manera:

$$P_{e.max} = \frac{4 \cdot B}{3 \cdot D_l / t_e} \quad \text{Equació 12.9.4.28}$$

on:

$P_{e.max}$ = Pressió externa màxima permesa (psi)

$B$ =Factor B. Es calcula gràficament.

$D_l$ = Diàmetre exterior en l'extrem gran (mm)

$t_e$ = Espessor efectiu de la xapa (mm)

Primer de tot cal suposar un espesor per a la xapa ( $t$ ), aquest serà el obtingut en el disseny a pressió interna menys el gruix afegit per corrosió (7,62 mm) ja que d'aquesta manera ens assegurem que en el pitjor dels casos, quan s'ha oxidat el màxim calculat, la xapa pugui aguantar la pressió.

$$t_e = t_{nova} - CA1 \cdot \cos \alpha = 15 - 7,62 \cdot \cos 30 = \mathbf{6,39 \text{ mm}}$$

Per al càlcul del factor B es segueix el procediment següent:

6. Es calcula la longitud equivalent de la secció cònica com:

$$L_e = \frac{L}{2} \cdot 1 + \frac{D_s}{D_l} \quad \text{Equació 12.9.4.29}$$

7. Es determina el valor de les relacions  $L_e/D_l$  i  $D_l/t_e$ .

8. S'agafa el valor de  $L_e/D_l$  (0,2) ( $L/D_0$  en el gràfic) i amb el figura 12.9.4.4 es

segueix horitzontalment fins la línia del gràfic amb el valor de  $D_l/t_e$  (471)

( $D_0/t$  al gràfic). Des de el punt d'intersecció es segueix verticalment per a

determinar el factor A.

El valor obtingut del factor A es de 0,0007.

9. A la figura 12.9.4.5 s'agafa el valor del factor A i es segueix verticalment fins la línia de temperatura de disseny (185°F) , des de la intersecció es segueix horitzontalment fins a trobar el valor del factor B.

El valor obtingut gràficament del factor B es de 7250.

Així doncs la pressió màxima permesa serà:

$$P_{e,max} = \frac{4 \cdot 7250}{3 \cdot 470} = 20,56 \text{ psi} = 1,42 \text{ bar}$$

Com que la pressió màxima permesa és superior a la pressió de disseny (15 psi) el gruix indicat per al tronc cònic es de 15 mm.

Amb aquest gruix trobem una pressió màxima interna d'operació amb la següent equació

$$P = \frac{2 \cdot S \cdot E \cdot t \cdot \cos \alpha}{D + 1,2 \cdot t \cdot \cos \alpha} \quad \text{Equació 12.9.4.30}$$

on:

t= espessor de la paret (mm)

P= pressió de disseny o pressió màxima de treball permesa (bar)

E= eficiència de la junta

D= diàmetre interior (mm)

S= valor del esforç del material (bar)

$\alpha$ = la meitat del angle en el vèrtex (graus)

$$P = \frac{2 \cdot 1082,46 \cdot 0,85 \cdot 15 \cdot \cos 30}{2985,11 + 1,2 \cdot 15 \cdot \cos 30} = 7,97 \text{ bar}$$

#### 12.9.4.4.2 Pes de l'equip

##### Pes de l'equip buit

El pes del equip buit es calcula tenint en compte el cos cilíndric, la secció cònica i el capçal toriesfèric amb les equacions següents.

$$M_{\text{cos cilíndric}} = \rho_{\text{material}} \cdot A_{\text{interna cos cilíndric}} \cdot t \quad \text{Equació 12.9.4.31}$$

$$M_{\text{capçal toriesfèric}} = \rho_{\text{material}} \cdot (V_{\text{extern toriesfèric}} - V_{\text{intern toriesfèric}}) \quad \text{Equació 12.9.4.32}$$

$$M_{\text{secció cònica}} = \rho_{\text{material}} \cdot (V_{\text{extern con}} - V_{\text{intern con}}) \quad \text{Equació 12.9.4.33}$$

$$M_{\text{mitja canya}} = \rho_{\text{material}} \cdot \frac{\pi \cdot D_{\text{intern mitja canya}} \cdot L}{2} \cdot t_{\text{mitja canya}} \quad \text{Equació 12.9.4.34}$$

on:

M = Pes (kg)

A= area (m<sup>2</sup>)

t = Espessor del material (m)

$\rho_{\text{material}}$ = Densitat del material (7800 Kg/m<sup>3</sup>)

V= Volum (m<sup>3</sup>)

$$V_{\text{extern toriesfèric}} = 0,0809 \cdot (D_{\text{cilindre}} + 2 \cdot t)^3 \quad \text{Equació 12.9.4.35}$$

$$V_{\text{intern toriesfèric}} = 0,0809 \cdot D_{\text{cilindre}}^3 \quad \text{Equació 12.9.4.36}$$

$$V_{extern\ con} = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot h \cdot \left( \frac{(D_{extern+t})^2}{4} + \frac{(d_{extern+t})^2}{4} + \frac{(D_{extern+t}) \cdot (d_{extern+t})}{4} \right) \quad \text{Equació}$$

**12.9.4.37**

$$V_{intern\ con} = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot h \cdot \left( \frac{D_{intern}^2}{4} + \frac{d_{intern}^2}{4} + \frac{D_{intern} \cdot d_{intern}}{4} \right) \quad \text{Equació 12.9.4.38}$$

$$M_{cos\ cilíndric} = 7800 \cdot 7,04 \cdot 0,02 = 1098,51\ kg$$

$$M_{capçal\ toriesfèric} = 7800 \cdot (2,26 - 2,17) = 688,02\ kg$$

$$M_{secció\ cònica} = 7800 \cdot (2,94 - 2,90) = 330,93\ kg$$

$$M_{mitja\ canya} = 7800 \cdot \frac{\pi \cdot 0,12 \cdot 131,16}{2} \cdot 0,0015 = 289,26\ kg$$

Es considera un 10% més de material per tal de tenir en compte soldadures, cargols, brides i similar, essent el pes final de l'equip buit:

$$M_{buit\ total} = 1,1 \cdot (1098,5 + 688,02 + 330,93 + 289,26) = \mathbf{2406,72\ kg}$$

Pes del cristal·litzador en operació

El pes en operació vindrà donat per la suma del equip buit mes el volum de magma a l'interior del cristal·litzador i el pes del oli tèrmic que circula per la mitja canya.

$$M_{equip\ operació} = M_{equip\ buit} + V_{líquid} \cdot \rho_{magma} + V_{oli\ tèrmic} \cdot \rho_{oli\ tèrmic} \quad \text{Equació}$$

**12.9.4.39**

$$M_{equip\ operació} = 2406,72 + 23,99 \cdot 946,33 + 0,74 \cdot 850 = \mathbf{25739,72\ kg}$$

Pes del cristal·litzador amb aigua

El pes del cristal·litzador en condicions de prova ve donat per la suma de l'equip buit i el seu interior ple d'aigua.

$$M_{equip\ prova} = M_{equip\ buit} + V_{líquid} \cdot \rho_{magma} \quad \text{Equació 12.9.4.40}$$

$$M_{equip\ prova} = 2430,16 + 23,99 \cdot 1000 = \mathbf{23990\ kg}$$

- **Espessor de l'aïllant:** Degut a que la temperatura de la carcassa és superior a 60°C (65°C) cal aïllar l'equip amb llana de roca. L'espessor d'aquest aïllant es pot calcular com:

$$X = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{\Delta T}{D_{ext}}\right)^{\frac{1}{4}}} \quad \text{Equació 12.9.4.41}$$

on:

- X = espessor de l'aïllant (cm)
- $\Delta T$  = diferència de temperatura entre l'interior i l'exterior del recipient  
(65 - 15)°C = 50.
- $D_{ext}$  = diàmetre exterior del recipient (m)

$$X = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{50}{3,03}\right)^{\frac{1}{4}}} = 4,14 \text{ cm}$$

Aquest aïllant quedarà recobert per una capa d'alumini per tal de protegir-lo de les inclemències meteorològiques.

El volum de l'aïllant es determina per poder-ne calcular el preu amb l'expressió següent:

$$V_{aïllant} = (A_{externa \text{ cos cilíndric}} + A_{externa \text{ con}}) \cdot X_{aïllant} \quad \text{Equació 12.9.4.42}$$

$$A_{externa \text{ cos cilíndric}} = \pi \cdot D_{extern \text{ cilindre}} \cdot H_{líquid} = \pi \cdot 3,03 \cdot 2,99 = 28,54 \text{ m}^2$$

$$A_{externa \text{ con}} = \pi \cdot (R + r) \cdot g = \pi \cdot (1,50 + 0,3) \cdot 1,2 = 6,86 \text{ m}^2$$

on:

A= Àrea (m<sup>2</sup>)

X= espessor de l'aïllant (m)

R= radi exterior a l'extrem gran (m)

r= radi exterior a l'extrem petit (m)

$$g = \text{generatriu del con} = \sqrt{h^2 + (R - r)^2} = 1,2 \text{ m}$$

$$V_{aïllant} = 1,46 \text{ m}^3$$

## 12.9.5 Cristal·litzador de creixement CR-602

### 12.9.5.1 Balanç de matèria

S'ha utilitzat l'equació que es l'equació per a un balanç de matèria general.

$$E + G = S + A \quad \text{Equació 12.9.5.1}$$

I tenint en compte que a la cristal·lització no hi ha generació ni acumulació de cristalls llavors s'ha reduït a la següent expressió:

$$E = S$$

On:

E = entrada

S = sortida

La entrada a aquest cristal·litzador consta del corrent de sortida del cristal·litzador CR-601, la sortida del tanc on es dissolen els cristalls formats al cristal·litzador CR-603, aquets corrents es barregen amb la recirculació interna que s'ha fixat a un 20% de la sortida del cos del cristal·litzador i s'introdueix al mateix.

A continuació es mostren els càlculs del balanç realitzat al cos del cristal·litzador on tenim lloc la formació dels cristalls i la evaporació del toluè.

El cabal d'entrada al cos del cristal·litzador CR-602 es calcula sumant el cabal que es recircula i els corrents esmentats.

$$\text{Cabal màssic}_{\text{toluè}} + \text{Cabal màssic}_{\text{Carbaryl}} + \text{Cabal màssic}_{\text{naftol}}$$

$$\begin{aligned} & [1328,95 \cdot (1 - 0,2) + 1017,78 \cdot 0,2 + 429,58] \\ & + [(1485,14 + 367,42) \cdot (1 - 0,2) + (1739,03 + 281,39) \cdot 0,2 + 15,52 + 118,77] \\ & + [103,11 \cdot (1 - 0,2) + 143,21 \cdot 0,2 + 32,08] \end{aligned}$$

$$\text{Cabal}_{\text{entrada}} = 1696,30 + 2020,42 + 143,21 = \mathbf{3859,93 \text{ Kg/h}}$$

Pel que fa el terme de sortida el primer que es fa es calcular la quantitat de toluè evaporat, aquesta determinarà la quantitat de cristalls formats, per arribar a assolir la producció desitjada. Aquest valor s'ha fixat en el 40%



$$1696,30 \frac{\text{Kg toluè}}{h} \cdot \frac{40}{100} = 678,52 \text{ Kg toluè evaporat/h}$$

Una vegada calculat això, es calcula el cabal de sortida del toluè del licor mare.

$$1696,30 - 678,52 = 1017,78 \text{ Kg toluè/h}$$

Amb aquest cabal i tenint en compte la solubilitat del Carbaryl, a la temperatura d'operació del cristal·litzador, s'ha calculat el cabal de Carbaryl del licor mare.

$$\text{Cabal màssic}_{\text{toluè}} \cdot \text{solubilitat Carbaryl}_{65^{\circ}\text{C}} = \text{Cabal màssic}_{\text{Carbaryl LM}}$$

$$\begin{aligned} & \frac{117,78 \text{ Kg Toluè}}{h} \cdot \frac{277,30 \text{ g Carbaryl}}{\text{Kg toluè}} \cdot \frac{1 \text{ Kg Carbaryl}}{1000 \text{ g Carbaryl}} \\ & = 367,42 \frac{\text{Kg Carbaryl LM}}{h} \end{aligned}$$

I restant-lo del cabal d'entrada s'han calculat els cristalls de Carbaryl format.

$$2020,42 - 281,39 = 1739,03 \text{ Kg Carbaryl}_{\text{cristall}}/h$$

Per al cas del naftol, com s'ha esmentat anteriorment, sempre es troba dissolt en el toluè, i per tant, entra i surt amb el licor mare.

El cabal total de sortida al cos del cristal·litzador és:

$$\begin{aligned} \text{Cabal}_{\text{sortida}} &= (678,52 + 1017,78) + (1739,03 + 181,39) + 143,21 \\ &= 3859,93 \text{ Kg/h} \end{aligned}$$

A les taules 12.9.5.1 i 12.9.5.2, es recullen les corrents d'entrada i sortida del cos del cristal·litzador, així com les propietats del mateix.

**Taula 12.9.5.1** Propietats d'operació del cristal·litzador CR-602

<b>T entrada (°C)</b>	71
<b>T operació(°C)</b>	65
<b>P (bar)</b>	0,16
<b>Toluè evaporat (%)</b>	0,4
<b>Recirculació (%)</b>	0,2

**Taula 12.9.5.2** Cabals d'entrada i sortida del cos del cristal·litzador CR-602

	ENTRADA		SORTIDA	
	F (Kg/h)	V (Kg/h)	S (Kg/h)	LM (Kg/h)
<b>Toluè</b>	1696,30	678,52	0,00	1017,78
<b>Carbaryl</b>	2020,42	0,00	1739,03	281,39
<b>Naftol</b>	143,21	0,00	0,00	143,21
<b>Total</b>	3859,93		3859,93	

on:

F= Corrent d'entrada al cos del cristal·litzador

V= Sortida vapor del cos del cristal·litzador

S= Sortida en fase sòlida del cos del cristal·litzador (Cristalls)

LM= Sortida en fase líquida del cos del cristal·litzador (Licor mare)

### 12.9.5.2 Balanç d'energia

Juntament amb el balanç de matèria és imprescindible realitzar el balanç d'energia del cristal·litzador. La formació dels cristalls dintre del cristal·litzador estan directament relacionats amb la quantitat de toluè evaporat i les temperatures d'entrada i d'operació.

Com s'ha esmentat abans, el cristal·litzador consta de dos equips on es requereix bescanviar la calor, aquests son un bescanviador de calor i el cos del cristal·litzador, per lo que s'ha realitzat un balanç d'energia per cada un d'ells

### 12.9.5.2.1 Balanç d'energia bescanviador

La funció del bescanviador es augmentar la temperatura 6°C del fluid abans d'entrar al cos del cristal·litzador, d'aquesta manera, s'ajuda a sobresaturar el magma dins del cristal·litzador i s'aporta part de l'energia necessària per escalfar la mescla localment i evaporar el dissolvent.

El calor a aportar per el bescanviador de calor es calcula amb l'equació següent:

$$Q = F \cdot C_{p_{mescla}} \cdot (T_2 - T_1) \text{ Equació 12.9.5.2}$$

on:

Q= calor a aportar (J/h)

F= cabal total (kg/h)

C<sub>p<sub>mescla</sub></sub>= calor específic d'ela mescla (J/kg)

T<sub>2</sub>= temperatura sortida del bescanviador (°C)

T<sub>1</sub>= temperatura entrada al bescanviador (°C)

Així doncs el calor que caldrà aportar serà:

$$Q = 3859,93 \cdot 1851 \cdot (71 - 65) = 4,29 \cdot 10^7 \text{ J/h} = 11,91 \text{ kW}$$

Un cop calculat el calor a bescanviar es calcula l'àrea mínima necessària amb l'equació:

$$A_{req} = \frac{Q}{U \cdot DTML} \text{ Equació 12.9.4.3}$$

on:

Q= calor a bescanviar (J/s)

A<sub>req</sub> = àrea de bescanvi de calor requerida. (m<sup>2</sup>)

U = coeficient de transferència de calor del sistema (W/m<sup>2</sup>·K). S'ha escollit tenint que s'escalfa un fluid orgànic amb oli tèrmic, 300 W/m<sup>2</sup>·K.

DTML = diferencial de temperatures mitjà logarítmic calculat com:

$$DTML = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}}$$

$$\Delta T_1 = T^{\circ} \text{entrada fluid detubs} - T^{\circ} \text{sortida fluid decarcassa}$$

$$\Delta T_2 = T^{\circ} \text{sortida fluid detubs} - T^{\circ} \text{entrada fluid decarcassa}$$

$$\Delta T_1 = 140 - 71 = 69$$

$$\Delta T_2 = 130 - 65 = 65$$

$$DTML = \frac{69 - 65}{\ln \frac{69}{65}} = 76,98$$

Amb aquests valors s'obté una àrea de bescanvi requerida de:

$$A_{req} = \frac{11916,67}{300 \cdot 76,98} = 0,52 \text{ m}^2$$

El cabal d'oli necessari per aconseguir aquest bescanvi de calor, tenint en compte que la temperatura del oli d'entrada serà la de sortida del cos del cristal·litzador, es pot calcular amb l'equació següent:

$$m_{oli} = \frac{Q}{Cp_{oli} \cdot \Delta T} \quad \text{Equació 12.9.5.4}$$

on:

Q= calor a bescanviar (J/h)

$m_{oli}$  = cabal màssic d'oli tèrmic (kg/h)

$Cp_{oli}$  = capacitat calorífica de l'oli tèrmic (kJ/kg·K)

$\Delta T$  = salt tèrmic de l'oli tèrmic entre l'entrada i la sortida (°C). El salt tèrmic de l'oli tèrmic és fixa a 10°C

$$m_{oli} = \frac{4,29 \cdot 10^7}{2050 \cdot 10} = 2092,68 \text{ kg/h}$$

#### 12.9.5.2.2 Balanç d'energia cos cristal·litzador

El balanç d'energia per al cos del cristal·litzador es calcula amb la següent equació:

$$Q = V \cdot \lambda_{vap} + S \cdot \lambda_{crist} - F \cdot Cp_F \cdot (T_1 - T_2) \quad \text{Equació 12.9.5.5}$$

on:

Q= calor a bescanviar (J/h)

V= cabal de vapor (kg/h)

$\lambda_{vap}$ = calor de vaporització del toluè (J/kg)

S= cristalls formats (kg/h)

$\lambda_{\text{crist}}$ = calor de crist·lització del Carbaryl (J/kg), [*GroundwaterChemicalsDeskReference, Fourth Edition* (pag 200)]

F= cabal total d'entrada (kg/h)

$C_{pF}$ = calor específic de la mescla d'entrada (J/kg)

$T_1$ = temperatura entrada al cristallitzador (°C)

$T_2$ = temperatura d'operació (°C)

$$Q = 678,52 \cdot 3,92 \cdot 10^5 + 1739,03 \cdot -1,2 \cdot 10^5 - 3859,93 \cdot 959,6 \\ \cdot (71 - 65) = 3,44 \cdot 10^7 J/h = \mathbf{9,55 kW}$$

Un cop calculat el calor a bescanviar es calcula l'àrea mínima necessària amb l'equació:

$$A_{req} = \frac{Q}{U \cdot DTML} \text{ Equació 12.9.5.6}$$

on:

Q= calor a bescanviar (J/s)

$A_{req}$  = àrea de bescanvi de calor requerida. (m<sup>2</sup>)

U = coeficient de transferència de calor del sistema (W/m<sup>2</sup>·K). S'ha escollit tenint que s'escalfa un fluid orgànic amb oli tèrmic, 300 W/m<sup>2</sup>·K.

DTML = diferencial de temperatures mitjà logarítmic calculat com:

$$DTML = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}}$$

$$\Delta T_1 = T^{\circ}\text{entrada vapor} - T^{\circ}\text{sortidamagma}$$

$$\Delta T_2 = T^{\circ}\text{sortida vapor} - T^{\circ}\text{entradamagma}$$

$$\Delta T_1 = 150 - 65 = 79$$

$$\Delta T_2 = 140 - 71 = 75$$

$$DTML = \frac{79 - 75}{\ln \frac{79}{75}} = \mathbf{76,98}$$

Amb aquests valors s'obté una àrea de bescanvi requerida de:

$$A_{req} = \frac{9,55 \cdot 10^3}{300 \cdot 76,98} = \mathbf{0,30 m^2}$$

El cabal d'oli necessari es calcula amb la següent equació:

$$m_{oli} = \frac{Q}{Cp_{oli} \cdot \Delta T} \quad \text{Equació 12.9.5.7}$$

On:

Q= calor a bescanviar (J/h)

$M_{oli}$  = cabal màssic de oli tèrmic (kg/h)

$Cp_{oli}$  = capacitat calorífica del oli tèrmic (kJ/kg·K)

$\Delta T$  = salt tèrmic de l'oli tèrmic entre l'entrada i la sortida (°C). Es fixa a 10°C

$$m_{oli} = \frac{3,44 \cdot 10^7}{2050 \cdot 10} = 1676,44 \text{ kg/h}$$

### 12.9.5.3 Disseny funcional

#### 12.9.5.3.1 Dimensionament de l'equip

El volum del cristal·litzador ve donat per el cabal a tractar que es conegut i el temps necessari per a assolir una mida determinada dels cristalls. Un terme molt important per a el càlcul del temps de cristal·lització es la velocitat de creixement dels cristalls, aquest valor no es conegut i per tant s'utilitzarà un valor típic igual a  $10^{-7}$  m/s.

En aquest cas s'ha decidit que la mida del cristall a formar sigui igual a 5 mm de diàmetre, per lo que s'ha decidit utilitzar cristal·litzadors del tipus Oslo els quals permeten una mida fins a 6 mm de diàmetre [<http://www.gea-messo-pt.com>].

L'equació per a calcular el temps de cristal·lització es la següent:

$$\tau = \frac{L}{3,67 \cdot G} \quad \text{Equació 12.9.5.8}$$

on:

$\tau$ = temps de cristal·lització (h)

L= longitud del cristall (m)

G= velocitat de creixement (m/s)

Per obtenir una mida del cristall de 5 mm el temps de cristal·lització és:

$$\tau = \frac{0,005 \text{ m}}{3,67 \cdot 10^{-7} \text{ m/h}} = \mathbf{4,63h}$$

Tal com es pot observar, el temps de residència està dins dels límits de temps establert per a un cristal·litzador d'aquestes característiques, entre 2 i 6 hores.

Així doncs el volum del cristal·litzador es calcula tal com es mostra a continuació

$$V = Q \cdot \tau \quad \text{Equació 12.9.5.9}$$

on:

V=volum (m<sup>3</sup>)

Q = cabal volumètric (m<sup>3</sup>/h)

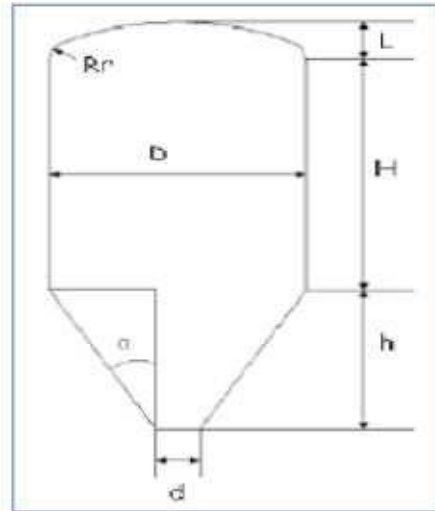
τ= temps de cristal·lització (h)

$$V = 1,72 \cdot 4,63 = \mathbf{7,98m^3}$$

Es fa un sobredimensionament d'aquest volum, 25 % més, per tal d'assegurar que hi càpiga tota la carrega.

$$V_{\text{sobredimensionat}} = 7,98 \cdot 1,25 = \mathbf{9,97m^3}$$

Tenint aquest volum sobredimensionat, es realitza un dimensionament tenint en compte que el cristal·litzador ha de disposar d'un fons cònic per afavorir la sortida del magma, per la part inferior, ja que aquest té una altra concentració de sòlids. Aquestes dimensions tenen com a restriccions inicials que l'alçada del fons cònic sigui igual a 1/3 de l'alçada del líquid a la part cilíndrica i que l'alçada del líquid de la part cilíndrica sigui igual al diàmetre del cristal·litzador. Amb tot això i les equacions descrites a continuació s'aplica un "solver", variant l'alçada del líquid del cilindre per que la suma dels volums de líquid de la part cònica i la part cilíndrica sigui igual al volum del líquid sobredimensionat del reactor, obtenint una alçada de 2,23 m.



**Figura 12.9.5.2** Esquema de les dimensions del cristal·litzador dossenyat

Per calcular el volum del líquid al cilindre:

$$V_{\text{líquid cilindre}} = \pi \cdot \left(\frac{D}{2}\right)^2 \cdot H \quad \text{Equació 12.9.5.10}$$

$$V_{\text{líquid cilindre}} = \pi \cdot \left(\frac{2,23}{2}\right)^2 \cdot 2,23 = 8,76 \text{ m}^3$$

on:

D= diàmetre del cilindre (m)

H= alçada del líquid al cilindre (m<sup>3</sup>)

Aquest volum només té en compte el líquid que hi haurà al cristal·litzador per lo que es fa un sobredimensionat de l'alçada del líquid perquè hi càpiguen els gasos evaporats, 20%, obtenint un valor de 2,68, a més a més i tenint en compte que és econòmicament més viable utilitzar una alçada normalitzada s'ha decidit que l'alçada final del cilindre sigui igual a 3 m. Amb això es calcularà el volum del cilindre:

$$V_{\text{cilindre}} = \pi \cdot \left(\frac{2,23}{2}\right)^2 \cdot 3 = 11,76 \text{ m}^3$$

Per calcular el volum del tronc cònic

$$V_{\text{tronc cònic}} = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot h \cdot \left(\frac{D^2}{4} + \frac{d^2}{4} + \frac{D \cdot d}{4}\right) \quad \text{Equació 12.9.5.11}$$



$$V_{\text{tronc cònic}} = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot 0,74 \cdot \left( \frac{2,23^2}{4} + \frac{0,45^2}{4} + \frac{2,23 \cdot 0,45}{4} \right) = 1,21 \text{ m}^3$$

on:

d = diàmetre del fons cònic

h = alçada del tronc cònic. Calculat com:

$$h = \frac{D-d/2}{\tan(\alpha)} \quad \text{Equació 12.9.5.12}$$

on:

$$\alpha = 30^\circ$$

$$h = \frac{2,23 - 0,45/2}{\tan(30)} = 0,74 \text{ m}$$

Obtenint un volum final igual a

$$V_{\text{final}} = V_{\text{cilindre}} + V_{\text{tronc cònic}} = 11,76 + 1,21 = 12,97 \text{ m}^3$$

### 12.9.5.3.2 Disseny mitja canya

Per a realitzar el bescanvi de calor dels cristal·litzadors s'ha escollit aquest mètode de escalfament degut a que la instal·lació de un serpenti a l'interior del cristal·litzador podria provocar incrustacions no desitjades que portarien al mal funcionament de l'equip. Per la mitja canya haurà de circular el cabal d'oli tèrmic calculat anteriorment en el balanç d'energia. Les velocitats típiques de líquid per l'interior de la mitja canya estan entre 2 i 5 m/s per assegurar que el coeficient de transferència de matèria no es veu afectat degut a una velocitat molt baixa i que les pèrdues de carrega no seran molt elevades degut a una velocitat molt alta. Així doncs caldrà calcular el diàmetre intern de la mitja canya per treballar amb una velocitat del oli tèrmic de 3 m/s.

$$v_{\text{oli}} = \frac{m_{\text{oli}}/\rho_{\text{oli}}}{\text{Àrea de pas}} = \frac{m_{\text{oli}}/\rho_{\text{oli}}}{\frac{(\frac{\pi}{4} \cdot D_i^2)}{4}} \quad \text{Equació 12.9.5.13}$$

Aïllant el diàmetre de l'equació queda:

$$D_i = \sqrt{\frac{m_{\text{oli}}/\rho_{\text{oli}} \cdot 4 \cdot 2}{\pi \cdot v_{\text{oli}}}} \quad \text{Equació 12.9.5.14}$$

on:

$v$  = velocitat oli tèrmic (m/s). Es fixa a 3 m/s

$m_{oli}$  = cabal màssic oli tèrmic (kg/s)

$\rho_{oli}$  = densitat oli tèrmic (kg/m<sup>3</sup>)

$D_i$  = diàmetre intern mitja canya (m)

$$D_i = \sqrt{\frac{0,466 / 835 \cdot 8}{\pi \cdot 3}} = \mathbf{0,022}$$

S'utilitzarà una mitja canya d'un diàmetre intern de 0,02 m.

La longitud requerida de la mitja canya amb el diàmetre escollit, considerant que es sobredimensiona un 25% l'àrea de bescanvi mínima requerida, es calcula amb l'equació següent:

$$L = \frac{A_{req} \cdot 1,25}{D_i} \quad \text{Equació 12.9.5.15}$$

on:

$A_{req}$  = Àrea de bescanvi mínima requerida (m<sup>2</sup>)

$D_i$  = Diàmetre intern mitja canya (m)

$$L = \frac{0,41 \cdot 1,25}{0,02} = \mathbf{25,83 \text{ m}}$$

El numero de voltes vindrà donat per el diàmetre del cristal·litzador i es calcula com es mostra a continuació:

$$n^{\circ} \text{ voltes} = \frac{L}{\pi \cdot D} \quad \text{Equació 12.9.5.16}$$

on:

$L$  = longitud de la mitja canya (m)

$D$  = diàmetre del cilindre (m)

$$n^{\circ} \text{ voltes} = \frac{25,83}{\pi \cdot 2,88} = 2,85 \approx \mathbf{3 \text{ voltes}}$$

Per tal de que la mitja canya ocupi tota la altura del líquid en el cilindre (H) es deixa un espai entre voltes, aquest espai es calcula amb l'equació següent:

$$\text{espai entre voltes} = \frac{H - (D_e \cdot n^\circ \text{ voltes})}{n^\circ \text{ voltes}} \quad \text{Equació 12.9.5.17}$$

on:

H= Alçada del líquid (m)

$D_e$  = Diemetre extern, considerant un gruix de la chapa de 1,5 mm

$$\text{espai entre voltes} = \frac{2,88 - (0,023 \cdot 3)}{3} = \mathbf{0,93 \text{ m}}$$

Per evitar que la mitja canya quedi per sobre del nivell del líquid en el cas que aquest disminueixi, es deixarà un espai de 0,9 m entre cada volta.

#### 12.9.5.4 Disseny mecànic

Es realitza el disseny mecànic del cristal·litzador tenint en compte el ja esmentat en el apartat 12.9.4.4

##### 12.9.5.4.1 Càlcul d'espessors

Aquest càlcul dependrà de la forma del recipient que es vol dissenyar, per al cas dels cristal·litzadors es dissenyaran recipients cilíndrics i recipients cònics.

##### 12.9.4.4.1.1 Cos cilíndric

##### Disseny a pressió interna

$$t = \frac{P \cdot R}{S \cdot E - 0,6 \cdot P} + C.A. \quad \text{Equació 12.9.5.20}$$

on:

t= espessor de la paret (mm)

P= pressió de disseny o pressió màxima de treball permesa (bar)

S= valor esforç del material (bar)

E= eficiència de la junta

R= radi interior (mm)

C.A.= sobreesspessor (mm)

El sobreesspessor per corrosió del material és de 0,508 mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobreesspessor serà 7,62 mm.

$$t = \frac{2,39 \cdot 1117,26}{1082,46 \cdot 0,85 - 0,6 \cdot 2,39} = 2,91 + 7,62 = 10,53 \text{ mm}$$

Per calcular la t comercial aquest valor s'arrodonirà al primer gruix de xapa comercial superior.

$$t_{\text{comercial}} = 12 \text{ mm}$$

#### Disseny a pressió externa

Com que l'equip treballa al buit caldrà assegurar-se que la xapa te el gruix suficient per a suportar la pressió externa, per això es calcula la pressió externa màxima amb la següent equació:

$$P_{e.max} = \frac{4 \cdot B}{3 \cdot D_0/t} \text{ Equació 12.9.5.21}$$

on:

$P_{e.max}$  = Pressió externa màxima permesa (psi).

B=Factor B. Es calcula gràficament.

$D_0$  = Diàmetre exterior (mm)

t = Espessor de la xapa (mm)

Primer de tot cal suposar un gruix per a la xapa, en aquest cas, el gruix calculat en el disseny a pressió interna no es suficient per a aguantar la pressió externa, a continuació es mostren els càlculs per a el gruix de xapa mínim per a que la pressió externa màxima permesa sigui superior a la màxima de disseny (15 psi)

El valor de t utilitzat serà el gruix del la xapa nova menys el gruix afegit per corrosió ja que d'aquesta manera ens assegurem que en el pitjor dels casos, quan s'ha oxidat el màxim calculat, la xapa pugui aguantar la pressió.

$$t = t_{\text{nova}} - CA1 = 20 - 7,62 = 12,38 \text{ mm}$$

Per al càlcul del factor B es segueix el procediment següent:

1. Es determina el valor de les relacions  $L/D_0$  i  $D_0/t$

2. S'agafa el valor de  $L/D_0$  (1,03) i amb la figura 12.9.5.4 es segueix horitzontalment fins la línia del gràfic amb el valor de  $D_0/t$  (234) . Des de el punt d'intersecció es segueix verticalment per a determinar el factor A.

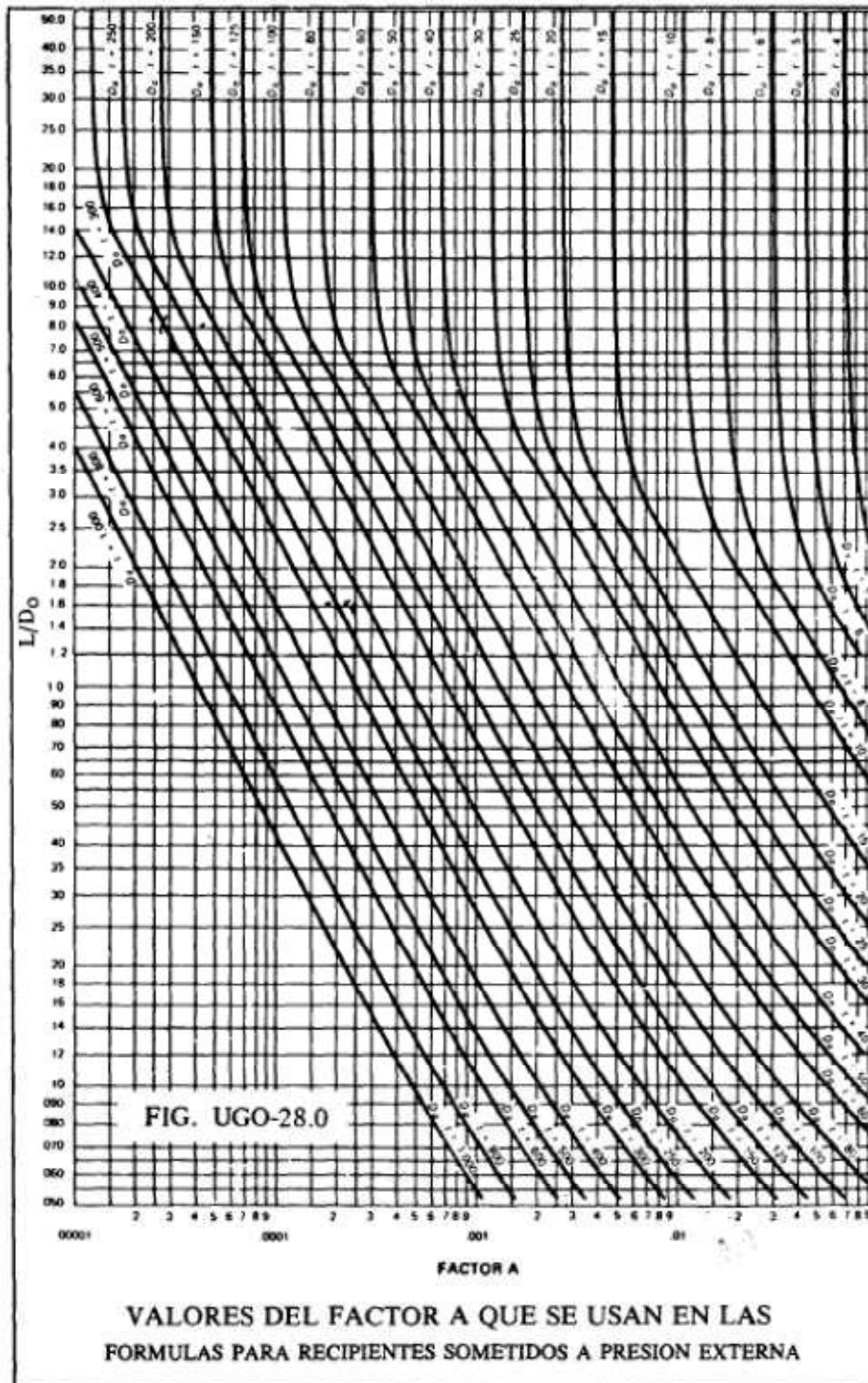
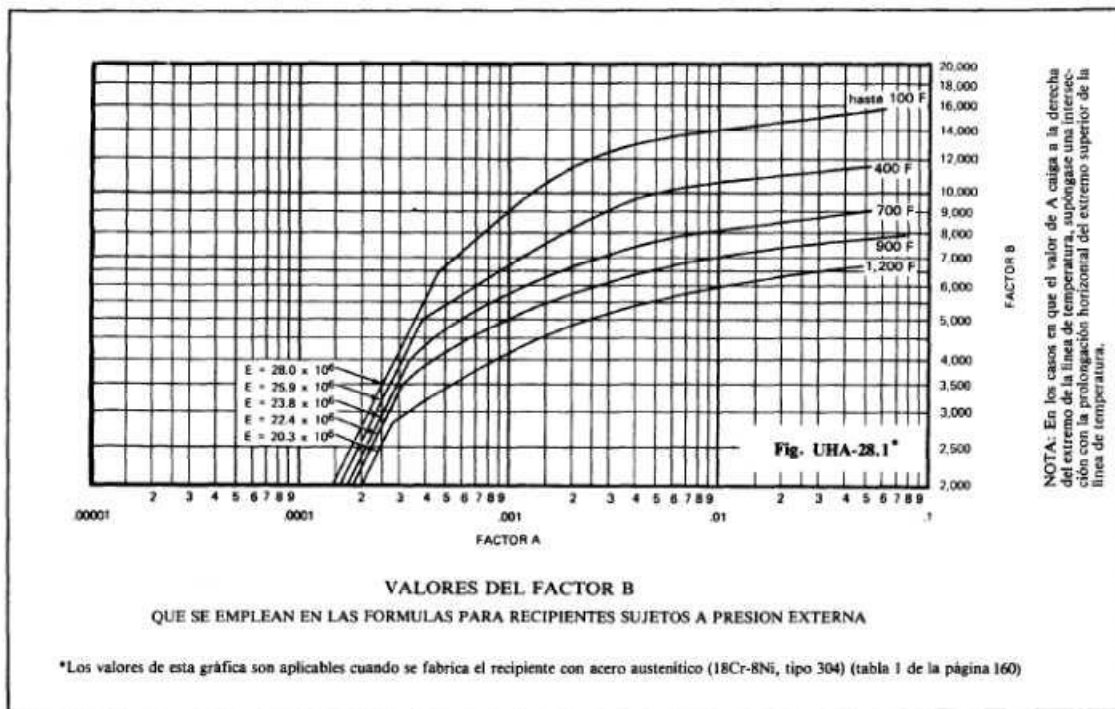


Figura 12.9.5.4 Figura utilitzada per a determinar el valor del factor A.

El valor obtingut del factor A es de 0,0004.

3. A la figura 12.9.5.5 s'agafa el valor del factor A i es segueix verticalment fins la línia de temperatura de disseny (185°F) , des de la intersecció es segueix horitzontalment fins a trobar el valor del factor B.



**Figura 12.9.5.5** Figura utilitzada per a determinar el valor del factor B.

El valor obtingut gràficament del factor B es de 5500.

Així doncs la pressió màxima permesa serà:

$$P_{e.max} = \frac{4 \cdot 5500}{3 \cdot 234} = 31,28 = \mathbf{2,16 \text{ bar}}$$

Com que la pressió màxima permesa és superior a la pressió de disseny (15 psi) el gruix indicat per al tronc cònic es de 20 mm.

Amb aquest gruix trobem una pressió màxima interna d'operació amb la següent equació

$$P = \frac{S \cdot E \cdot t}{R + 0,6 \cdot t} \quad \text{Equació 12.9.5.22}$$

on:

t= espessor de la paret (mm)

P= pressió de disseny o pressió màxima de treball permesa (bar)

E= eficiència de la junta

R= radi interior (mm)

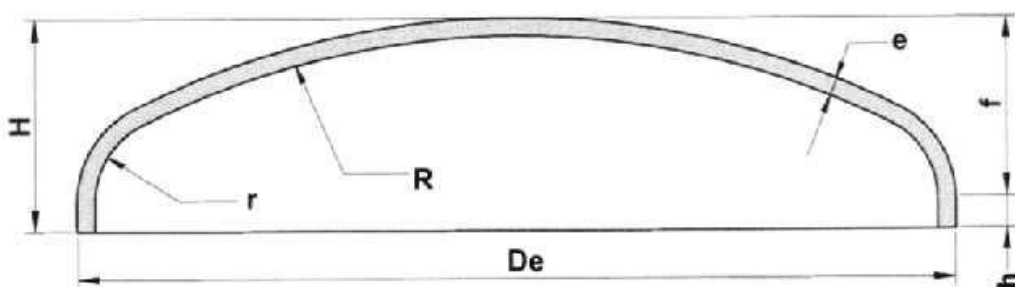
S= valor del esforç del material (bar)

$$P = \frac{1082,46 \cdot 0,85 \cdot 20}{1117,26 + 0,6 \cdot 20} = 16,3 \text{ bar}$$

#### 12.9.5.4.1.2 Capçal toriesfèric

##### Disseny a pressió interna

Els tipus de capçals més utilitzats són el toriesfèric, l'hemisfèric i l'el·lipsoïdal, en aquest cas s'utilitza el toriesfèric ja que és el més comú en la indústria química.



**Figura 12.9.5.6** Esquema de les dimensions d'un capçal tipus toriesfèric.

Aquest capçal ve definit pel radi de la corona (L) i el radi del colze (r) que es calculen respecte al diàmetre intern de la carcassa:

$$L = D = 2234,51 \text{ mm}$$

$$r = 0,1 \cdot D = 234,45 \text{ mm}$$

$$\frac{L}{r} = 10$$

Per una relació R/r menor de 16,67 l'espessor es calcula amb l'expressió següent:

$$t_f = \frac{P \cdot L \cdot M}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad \text{Equació 12.9.4.23}$$

on:

$t_f$  = espessor del capçal (mm)

P = pressió de disseny del recipient (bar)

M = factor que depèn de la relació R/r, en aquest cas igual a 1,54

E = factor de soldadura (radiografiat doble parcial)

S = càrrega admissible del material (bar)

$C_1$  = marge per corrosió (mm)

$C_2$  = tolerància de fabricació (mm)

$$t_f = \frac{2,39 \cdot 2234,51 \cdot 1,54}{2 \cdot 1082,46 \cdot 0,85 - 0,2 \cdot 2,39} + 7,62 + 0,45 = 12,55 \text{ mm}$$

Finalment el valor de l'espessor dels capçals, evitant costos de fabricació específics:

$$\text{espessor dels capçals} = 15 \text{ mm}$$

### Disseny a pressió externa

Com que l'equip treballa al buit caldrà assegurar-se que la xapa té el gruix suficient per a suportar la pressió externa, per això es calcula la pressió externa màxima amb la següent equació:

$$P_{e.max} = \frac{B}{L_0/t} \quad \text{Equació 12.9.4524}$$

on:

$P_{e.max}$  = Pressió externa màxima permesa (psi)

B = Factor B. Es calcula gràficament.

$L_0$  = Radi exterior de la peça (mm)

t = Espessor de la xapa (mm)

Primer de tot cal suposar un gruix per a la xapa, en aquest cas, el gruix calculat en el disseny a pressió interna no es suficient per a aguantar la pressió externa, a continuació es mostren els càlculs per a el gruix de xapa mínim per a que la pressió externa màxima permesa sigui superior a la màxima de disseny (15 psi)

$$t = t_{nova} - CA1 - CA2 = 20 - 7,62 - 0,576 = 11,804$$



on:

$t_{nova}$ = espessor de la xapa comercial (mm)

CA1= gruix per corrosió (mm)

CA2= tolerància per la curvatura de la peça (mm)

Per al càlcul del factor B es segueix el procediment següent:

1. Calcular el valor de A amb l'equació següent:

$$A = \frac{0,125}{L_0/t} \quad \text{Equació 12.9.5.25}$$

on:

$L_0$ = Radi exterior de la peça (113,29 mm)

A= factor A

t= gruix de la xapa (mm)

$$A = \frac{0,125}{2877,46/11,804} = 0,0005$$

2. A la figura 12.9.5.4 s'agafa el valor del factor A i es segueix verticalment fins la línia de temperatura de disseny (185°F) , des de la intersecció es segueix horitzontalment fins a trobar el valor del factor B. En aquest cas el valor obtingut de B és de 6250.

Així doncs la pressió externa màxima permesa és:

$$P_{e.max} = \frac{6250}{2877,46/11,804} = 25,64 \text{ psi} = \mathbf{1,768 \text{ bar}}$$

La pressió externa màxima permesa és superior a la pressió externa de disseny, per tant, el gruix de la xapa ha de ser de 15 mm.

Amb aquest gruix trobem una pressió màxima interna d'operació amb la següent equació

$$P = \frac{2 \cdot S \cdot E \cdot t}{L \cdot M + 0,2 \cdot t} \quad \text{Equació 12.9.5.26}$$

on:

t= espessor de la paret (mm)

P= pressió de disseny o pressió màxima de treball permesa (bar)

E= eficiència de la junta

L= radi interior del casquet (mm)

M= factor adimensional

S= valor del esforç del material (bar)

$$P = \frac{2 \cdot 1082,46 \cdot 0,85 \cdot 15}{2234,51 \cdot 1,54 + 0,2 \cdot 15} = \mathbf{8 \text{ bar}}$$

#### 12.9.5.4.1.3 Secció cònica

##### Disseny a pressió interna

$$t = \frac{P \cdot D}{2 \cdot \cos \alpha \cdot (S \cdot E - 0,6 \cdot P)} + C.A. \quad . \quad \text{Equació 12.9.5.27}$$

on:

t= espessor de la paret (mm)

P= pressió de disseny o pressió màxima de treball permesa (bar)

S= valor esforç del material (bar)

E= eficiència de la junta

D= diàmetre interior (mm)

$\alpha$ = la meitat del angle en el vèrtex (graus)

C.A.= sobreessessor (mm)

$$t = \frac{2,47 \cdot 2234,51}{2 \cdot \cos 30 \cdot (1082,46 \cdot 0,85 - 0,6 \cdot 2,47)} = 3,47 + 7,62 = 11,09 \text{ mm}$$

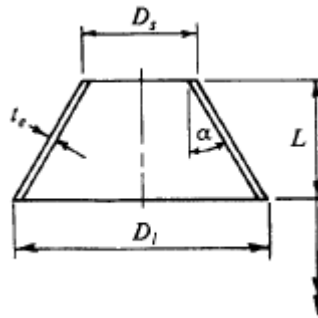
Per calcular la t comercial aquest valor s'arrodonirà al primer gruix de xapa comercial superior.

$$t_{\text{comercial}} = \mathbf{12 \text{ mm}}$$

Disseny a pressió externa

Com que l'equip treballarà al buit cal comprovar que el gruix calculat per a pressió interna serà suficient per a aguantar la pressió externa de disseny que serà igual a la pressió atmosfèrica (15 psi).

A la figura 12.9.5.7 es mostra la notació que s'utilitzarà per a definir les mides del fons cònic i que s'utilitzaran a les formules.



**Figura 12.9.5.7** Notació utilitzada per a les mides del fons cònic

$D_s$ = Diàmetre exterior a l'extrem petit ( 590,25 mm)

$D_l$ = Diàmetre exterior a l'extrem gran (2892,22 mm)

$L$ = Longitud del con (959,15 mm)

$\alpha$ = La mitat de l'angle al vèrtex (30°)

$t_e$ = Espessor efectiu de la xapa (mm).  $t_e = t \cdot \cos \alpha$

La pressió externa màxima permesa es calcula de la següent manera:

$$P_{e.max} = \frac{4 \cdot B}{3 \cdot D_l / t_e} \quad \text{Equació 12.9.5.28}$$

on:

$P_{e.max}$ = Pressió externa màxima permesa (psi)

$B$ =Factor B. Es calcula gràficament.

$D_l$ = Diàmetre exterior en l'extrem gran (mm)

$t_e$ = Espessor efectiu de la xapa (mm)

Primer de tot cal suposar un gruix per a la xapa, aquest serà el obtingut en el disseny a pressió interna menys el gruix afegit per corrosió (7,62 mm) ja que d'aquesta manera ens assegurem que en el pitjor dels casos, quan s'ha oxidat el màxim calculat, la xapa pugui aguantar la pressió.

$$t_e = t_{nova} - CA1 \cdot \cos \alpha = 15 - 7,62 \cdot \cos 30 = 6,39 \text{ mm}$$

Per al càlcul del factor B es segueix el procediment següent:

1. Es calcula la longitud equivalent de la secció cònica com:

$$L_e = \frac{L}{2} \cdot 1 + \frac{D_s}{D_l} \quad \text{Equació 12.9.5.29}$$

2. Es determina el valor de les relacions  $L_e/D_l$  i  $D_l/t_e$ .
3. S'agafa el valor de  $L_e/D_l$  (0,2) ( $L/D_0$  en el gràfic) i amb el figura 12.9.5.4 es segueix horitzontalment fins la línia del gràfic amb el valor de  $D_l/t_e$  (452) ( $D_0/t$  al gràfic). Des de el punt d'intersecció es segueix verticalment per a determinar el factor A.

El valor obtingut del factor A es de 0,0008.

4. A la figura 12.9.5.5 s'agafa el valor del factor A i es segueix verticalment fins la línia de temperatura de disseny (185°F) , des de la intersecció es segueix horitzontalment fins a trobar el valor del factor B.

El valor obtingut gràficament del factor B es de 7500.

Així doncs la pressió màxima permesa serà:

$$P_{e.max} = \frac{4 \cdot 7500}{3 \cdot 452} = 22,10 \text{ psi} = \mathbf{1,52 \text{ bar}}$$

Com que la pressió màxima permesa és superior a la pressió de disseny (15 psi) el gruix indicat per al tronc cònic es de 12 mm.

Amb aquest gruix trobem una pressió màxima interna d'operació amb la següent equació

$$P = \frac{2 \cdot S \cdot E \cdot t \cdot \cos \alpha}{D + 1,2 \cdot t \cdot \cos \alpha} \quad \text{Equació 12.9.5.30}$$

on:

t= espessor de la paret (mm)

P= pressió de disseny o pressió màxima de treball permesa (bar)

E= eficiència de la junta

D= diàmetre interior (mm)

S= valor del esforç del material (bar)

$\alpha$ = la meitat del angle en el vèrtex (graus)

$$P = \frac{2 \cdot 1082,46 \cdot 0,85 \cdot 12 \cdot \cos 30}{2234,51 + 1,2 \cdot 12 \cdot \cos 30} = \mathbf{8,51 \text{ bar}}$$

#### 12.9.5.4.2 Pes de l'equip

##### Pes d l'equip buit

El pes del equip buit es calcula tenint en compte el cos cilíndric, la secció cònica i el capçal toriesfèric amb les equacions següents.

$$M_{\text{cos cilíndric}} = \rho_{\text{material}} \cdot A_{\text{interna cos cilíndric}} \cdot t \quad \text{Equació 12.9.5.31}$$

$$M_{\text{capçal toriesfèric}} = \rho_{\text{material}} \cdot (V_{\text{extern toriesfèric}} - V_{\text{intern toriesfèric}}) \quad \text{Equació 12.9.5.32}$$

$$M_{\text{secció cònica}} = \rho_{\text{material}} \cdot (V_{\text{extern con}} - V_{\text{intern con}}) \quad \text{Equació 12.9.5.33}$$

$$M_{\text{mitja canya}} = \rho_{\text{material}} \cdot \frac{\pi \cdot D_{\text{intern mitja canya}} \cdot L}{2} \cdot t_{\text{mitja canya}} \quad \text{Equació 12.9.5.34}$$

on:

M = Pes (kg)

A= area (m<sup>2</sup>)

t = Espessor del material (m)

$\rho_{\text{material}}$ = Densitat del material (7800 Kg/m<sup>3</sup>)

V= Volum (m<sup>3</sup>)

$$V_{\text{extern toriesfèric}} = 0,0809 \cdot (D_{\text{cilindre}} + 2 \cdot t)^3 \quad \text{Equació 12.9.5.35}$$

$$V_{intern\ toriesfèric} = 0,0809 \cdot D_{cilindre}^3 \quad \text{Equació 12.9.5.36}$$

$$V_{extern\ con} = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot h \cdot \left( \frac{(D_{extern+t})^2}{4} + \frac{(d_{extern+t})^2}{4} + \frac{(D_{extern+t}) \cdot (d_{extern+t})}{4} \right) \quad \text{Equació 12.9.5.37}$$

$$V_{intern\ con} = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot h \cdot \left( \frac{D_{intern}^2}{4} + \frac{d_{intern}^2}{4} + \frac{D_{intern} \cdot d_{intern}}{4} \right) \quad \text{Equació 12.9.5.38}$$

$$M_{cos\ cilíndric} = 7800 \cdot 6,5 \cdot 0,02 = 1014,46 \text{ kg}$$

$$M_{capçal\ toriesfèric} = 7800 \cdot (1,99 - 1,93) = 475,14$$

$$M_{secció\ cònica} = 7800 \cdot (2,61 - 2,58) = 244,32$$

$$M_{mitja\ canya} = 7800 \cdot \frac{\pi \cdot 0,02 \cdot 25,83}{2} \cdot 0,0015 = 9,50 \text{ kg}$$

Es considera un 10% més de material per tal de tenir en compte soldadures, cargols, brides i similar, essent el pes final de l'equip buit:

$$M_{buit\ total} = 1,1 \cdot (1014,46 + 244,32 + 475,14 + 9,50) = \mathbf{1743,41 \text{ kg}}$$

#### Pes del cristal·litzador en operació

El pes en operació vindrà donat per la suma del equip buit mes el volum de magma a l'interior del cristal·litzador, el pes del vapor que circula per la mitja canya es considera menyspreable.

$$M_{equip\ operació} = M_{equip\ buit} + V_{líquid} \cdot \rho_{magma} + V_{oli\ tèrmic} \cdot \rho_{oli\ tèrmic} \quad \text{Equació 12.9.5.39}$$

$$M_{equip\ operació} = 1743,44 + 21,29 \cdot 1049,17 + 3,45 \cdot 850 = \mathbf{24083,64 \text{ kg}}$$

#### Pes del cristal·litzador amb aigua

El pes del cristal·litzador en condicions de prova ve donat per la suma de l'equip buit i el seu interior ple d'aigua.

$$M_{equip\ prova} = M_{equip\ buit} + V_{líquid} \cdot \rho_{magma} \quad \text{Equació 12.9.5.40}$$

$$M_{equip\ prova} = 24084,47 + 21,29 \cdot 1000 = \mathbf{23033,41 \text{ kg}}$$

- Espessor de l'aïllant: Degut a que la temperatura de la carcassa és superior a 60°C (65°C) cal aïllar l'equip amb llana de roca. L'espessor d'aquest aïllant es pot calcular com:

$$X = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{\Delta T}{D_{ext}}\right)^{\frac{1}{4}}} \quad \text{Equació 12.9.5.41}$$

on:

- X = espessor de l'aïllant (cm)
- ΔT = diferència de temperatura entre l'interior i l'exterior del recipient  
(65 - 15)°C = 50.
- D<sub>ext</sub> = diàmetre exterior del recipient (m)

$$X = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{50}{2,92}\right)^{\frac{1}{4}}} = 4,10 \text{ cm}$$

Aquest aïllant quedarà recobert per una capa d'alumini per tal de protegir-lo de les inclemències meteorològiques.

El volum de l'aïllant es determina per poder-ne calcular el preu amb l'expressió següent:

$$V_{aïllant} = (A_{externa \text{ cos cilíndric}} + A_{externa \text{ con}}) \cdot X_{aïllant} \quad \text{Equació 12.9.5.42}$$

$$A_{externa \text{ cos cilíndric}} = \pi \cdot D_{extern \text{ cilindre}} \cdot H_{líquid} = \pi \cdot 2,92 \cdot 2,88 = 26,37 \text{ m}^2$$

$$A_{externa \text{ con}} = \pi \cdot (R + r) \cdot g = \pi \cdot (1,44 + 0,29) \cdot 1,12 = 6,08 \text{ m}^2$$

on:

A= Àrea (m<sup>2</sup>)

X= espessor de l'aïllant (m)

R= radi exterior a l'extrem gran (m)

r= radi exterior a l'extrem petit (m)

$$g = \text{generatriu del con} = \sqrt{h^2 + (R - r)^2} = 1,12 \text{ m}$$

$$V_{aïllant} = 1,33 \text{ m}^3$$

## 12.9.6 Cristal·litzador de nucleació CR-603

### 12.9.6.1 Balanç de matèria

S'ha utilitzat l'equació 12.9.6.1 que es l'equació per a un balanç de matèria general.

$$E + G = S + A \quad \text{Equació 12.9.6.1}$$

Tenint en compte que a la cristal·lització no hi ha generació ni acumulació de cristalls llavors s'ha reduït a la següent expressió:

$$E = S$$

On:

E = entrada

S = sortida

La entrada a aquest cristal·litzador es la sortida del tanc de licor mare T-601, aquesta es barreja amb la recirculació interna que s'ha fixat a un 20% de la sortida del cos del cristal·litzador i s'introdueix al mateix.

A continuació es mostren els càlculs del balanç realitzat al cos del cristal·litzador on tenim la formació dels cristalls i la evaporació del toluè.

El cabal d'entrada al cos del cristal·litzador CR-603 es calcula sumant el cabal que es recircula i el corrent anomenat.

$$\text{Cabal màssic}_{\text{toluè}} + \text{Cabal màssic}_{\text{Carbaryl}} + \text{Cabal màssic}_{\text{naftol}}$$

$$(569,96 + 175,46 \cdot 0,2) + [157,58 + (148,46 + 48,51) \cdot 0,2] + (80,20 + 100,25 \cdot 0,2)$$

$$\text{Cabal}_{\text{entrada}} = 605,05 + 196,97 + 100,25 = \mathbf{902,27 \text{ Kg/h}}$$

Pel que fa el terme de sortida el primer que es fa es calcular la quantitat de toluè evaporat, aquesta determinarà la quantitat de cristalls formats, per arribar a assolir la producció desitjada. Aquest valor s'ha fixat en el 71%



$$605,05 \frac{\text{Kg toluè}}{h} \cdot \frac{71}{100} = 429,58 \text{ Kg toluè evaporat/h}$$

Una vegada calculat això s'ha trobat el cabal de sortida del toluè del licor mare.

$$605,05 - 429,58 = 175,46 \text{ Kg toluè}_{LM}/h$$

Amb aquest cabal i tenint en compte la solubilitat del Carbaryl, a la temperatura d'operació del cristal·litzador, s'ha calculat el cabal de Carbaryl del licor mare.

$$\text{Cabal màssic}_{\text{toluè}} \cdot \text{solubilitat Carbaryl}_{65^{\circ}\text{C}} = \text{Cabal màssic}_{\text{Carbaryl LM}}$$

$$\frac{605,05 \text{ Kg Toluè}}{h} \cdot \frac{277,30 \text{ g Carbaryl}}{\text{Kg toluè}} \cdot \frac{1 \text{ Kg Carbaryl}}{1000 \text{ g Carbaryl}} = 148,51 \frac{\text{Kg Carbaryl LM}}{h}$$

I restant-lo del cabal d'entrada s'han calculat els cristalls de Carbaryl format

$$196,97 - 48,51 = 148,46 \text{ Kg Carbaryl}_{\text{cristall}}/h$$

Per al cas del naftol, com s'ha comentat anteriorment sempre es troba dissolt en el toluè, i per tant, entra i surt amb el licor mare.

El cabal total de sortida al cos del cristal·litzador és:

$$\text{Cabal}_{\text{sortida}} = (429,58 + 175,46) + (148,46 + 48,51) + 100,25 = 902,27 \text{ Kg/h}$$

A les taules 12.9.6.1 i 12.9.6.2, es recullen les corrents d'entrada i sortida del cos del cristal·litzador, així com les propietats del mateix.

**Taula 12.9.4.1** Propietats d'operació del cristal·litzador CR-603

<b>T entrada (°C)</b>	71
<b>T operació(°C)</b>	65
<b>P (bar)</b>	0,16
<b>Toluè evaporat (%)</b>	0,71

**Taula 12.9.5.2** Cabals d'entrada i sortida del cos del cristal·litzador CR-603

	ENTRADA	SORTIDA		
	F (Kg/h)	V (Kg/h)	S (Kg/h)	LM (Kg/h)
<b>Toluè</b>	605,05	429,58	0,00	175,46
<b>Carbaryl</b>	196,97	0,00	148,46	48,51
<b>Naftol</b>	100,25	0,00	0,00	100,25
<b>total</b>	902,27	902,27		

on:

F= Corrent d'entrada al cos del cristal·litzador

V= Sortida vapor del cos del cristal·litzador

S= Sortida en fase sòlida del cos del cristal·litzador (Cristalls)

LM= Sortida en fase líquida del cos del cristal·litzador (Licor mare)

### 12.9.6.2 Balanç d'energia

Juntament amb el balanç de matèria és imprescindible realitzar el balanç d'energia del cristal·litzador. La formació dels cristalls dintre del cristal·litzador estan directament relacionats amb la quantitat de toluè evaporat i les temperatures d'entrada i d'operació.

Com s'ha esmentat abans, el cristal·litzador consta de dos equips on es requereix bescanviar la calor, aquests son un bescanviador de calor i el cos del cristal·litzador, per lo que s'ha realitzat un balanç d'energia per cada un d'ells

#### 12.9.6.2.1 Balanç d'energia bescanviador

La funció del bescanviador es augmentar la temperatura 6°C del fluid abans d'entrar al cos del cristal·litzador, d'aquesta manera, s'ajuda a sobresaturar el magma dins del cristal·litzador i s'aporta part de l'energia necessària per escalfar la mescla localment i evaporar el dissolvent.

El calor a aportar per el bescanviador de calor es calcula amb l'equació següent:

$$Q = F \cdot Cp_{mescla} \cdot (T_2 - T_1) \quad \text{Equació 12.9.6.2}$$

on:

Q= calor a aportar (J/h)

F= cabal total (kg/h)

Cp<sub>mescla</sub>= calor específic d'ela mescla (J/kg)

T<sub>2</sub>= temperatura sortida del bescanviador (°C)

T<sub>1</sub>= temperatura entrada al bescanviador (°C)

Així doncs el calor que caldrà aportar serà:

$$Q = 902,27 \cdot 1756 \cdot (71 - 65) = 9,51 \cdot 10^6 J/h = \mathbf{2,64 kW}$$

Un cop calculat el calor a bescanviar es calcula l'àrea mínima necessària amb l'equació:

$$A_{req} = \frac{Q}{U \cdot DTML} \quad \text{Equació 12.9.6.3}$$

on:

Q= calor a bescanviar (J/s)

A<sub>req</sub> = àrea de bescanvi de calor requerida. (m<sup>2</sup>)

U = coeficient de transferència de calor del sistema (W/m<sup>2</sup>·K). S'ha escollit tenint que s'escalfa un fluid orgànic amb oli tèrmic, 300 W/m<sup>2</sup>·K.

DTML = diferencial de temperatures mitjà logarítmic calculat com:

$$DTML = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}}$$

$$\Delta T_1 = T^{\circ} \text{entrada fluid de tubs} - T^{\circ} \text{sortida fluid de carcassa}$$

$$\Delta T_2 = T^{\circ} \text{sortida fluid de tubs} - T^{\circ} \text{entrada fluid de carcassa}$$

$$\Delta T_1 = 140 - 71 = 69$$

$$\Delta T_2 = 130 - 65 = 65$$

$$DTML = \frac{69 - 65}{\ln \frac{69}{65}} = \mathbf{76,98}$$

Amb aquests valors s'obté una àrea de bescanvi requerida de:

$$A_{req} = \frac{2640}{300 \cdot 76,98} = \mathbf{0,11 m^2}$$

El cabal d'oli necessari per aconseguir aquest bescanvi de calor, tenint en compte que la temperatura del oli d'entrada serà la de sortida del cos del cristal·litzador, es pot calcular amb l'equació següent:

$$m_{oli} = \frac{Q}{Cp_{oli} \cdot \Delta T} \quad \text{Equació 12.9.6.4}$$

on:

Q= calor a bescanviar (J/h)

$m_{oli}$  = cabal màssic d'oli tèrmic (kg/h)

$Cp_{oli}$  = capacitat calorífica de l'oli tèrmic (kJ/kg·K)

$\Delta T$  = salt tèrmic de l'oli tèrmic entre l'entrada i la sortida (°C). El salt tèrmic de l'oli tèrmic és fixa a 10°C

$$m_{oli} = \frac{9,51 \cdot 10^6}{2050 \cdot 10} = 463,90 \text{ kg/h}$$

#### 12.9.6.2.2 Balanç d'energia cos cristal·litzador

El balanç d'energia per al cos del cristal·litzador es calcula amb la següent equació:

$$Q = V \cdot \lambda_{vap} + S \cdot \lambda_{crist} - F \cdot Cp_F \cdot (T_1 - T_2) \quad \text{Equació 12.9.6.5}$$

on:

Q= calor a bescanviar (J/h)

V= cabal de vapor (kg/h)

$\lambda_{vap}$ = calor de vaporització del toluè (J/kg)

S= cristalls formats (kg/h)

$\lambda_{crist}$ = calor de cristal·lització del Carbaryl (J/kg), [*GroundwaterChemicalsDeskReference, Fourth Edition* (pag 200)]

F= cabal total d'entrada (kg/h)

$Cp_F$ = calor específic de la mescla d'entrada (J/kg)

$T_1$ = temperatura entrada al cristal·litzador (°C)

$T_2$ = temperatura d'operació (°C)

$$Q = 429,58 \cdot 3,92 \cdot 10^5 + 148,46 \cdot -1,2 \cdot 10^5 - 902,27 \cdot 1275,69 \cdot (71 - 65) = 1,44 \cdot 10^8 \text{ J/h} = 39,94 \text{ kW}$$

Un cop calculat el calor a bescanviar es calcula l'àrea mínima necessària amb l'equació:

$$A_{req} = \frac{Q}{U \cdot DTML} \quad \text{Equació 12.9.6.6}$$

on:

Q= calor a bescanviar (J/s)

A<sub>req</sub> = àrea de bescanvi de calor requerida. (m<sup>2</sup>)

U = coeficient de transferència de calor del sistema (W/m<sup>2</sup>·K). S'ha escollit tenint que s'escalfa un fluid orgànic amb oli tèrmic, 300 W/m<sup>2</sup>·K.

DTML = diferencial de temperatures mitjà logarítmic calculat com:

$$DTML = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}}$$

$$\Delta T_1 = T^{\circ} \text{entrada vapor} - T^{\circ} \text{sortidamagma}$$

$$\Delta T_2 = T^{\circ} \text{sortida vapor} - T^{\circ} \text{entradamagma}$$

$$\Delta T_1 = 150 - 65 = 79$$

$$\Delta T_2 = 140 - 71 = 75$$

$$DTML = \frac{79 - 75}{\ln \frac{79}{75}} = 76,98$$

Amb aquests valors s'obté una àrea de bescanvi requerida de:

$$A_{req} = \frac{3,99 \cdot 10^4}{300 \cdot 47,552} = 1,73 \text{ m}^2$$

El cabal d'oli necessari es calcula amb la següent equació:

$$m_{oli} = \frac{Q}{c_{p_{oli}} \cdot \Delta T} \quad \text{Equació 12.9.6.7}$$

on:

Q= calor a bescanviar (J/h)

M<sub>oli</sub> = cabal màssic de oli tèrmic (kg/h)

c<sub>p<sub>oli</sub></sub> = capacitat calorífica del oli tèrmic (kJ/kg·K)

ΔT = salt tèrmic de l'oli tèrmic entre l'entrada i la sortida (°C). Es fixa a 10°C

$$m_{oli} = \frac{1,44 \cdot 10^8}{2050 \cdot 10} = 7014,61 \text{ kg/h}$$

### 12.9.6.3 Disseny funcional

#### 12.9.6.3.1 Dimensionament de l'equip

El volum del cristal·litzador ve donat per el cabal a tractar que es conegut i el temps necessari per a assolir una mida determinada dels cristalls. Un terme molt important per a el càlcul del temps de cristal·lització es la velocitat de creixement dels cristalls, aquest valor no es conegut i per tant s'utilitzarà un valor típic igual a  $10^{-7}$  m/s.

En aquest cas s'ha decidit que la mida del cristall a formar sigui igual a 3 mm de diàmetre, per lo que s'ha decidit utilitzar cristal·litzadors del tipus Oslo els quals permeten una mida fins a 6 mm de diàmetre [<http://www.gea-messo-pt.com>].

L'equació per a calcular el temps de cristal·lització es la següent:

$$\tau = \frac{L}{3,67 \cdot G} \quad \text{Equació 12.9.6.8}$$

on:

$\tau$  = temps de cristal·lització (h)

L= longitud del cristall (m)

G= velocitat de creixement (m/s)

Per obtenir un tamany del cristall de 3 mm el temps de cristal·lització és:

$$\tau = \frac{0,003 \text{ m}}{3,67 \cdot 10^{-7} \text{ m/h}} = 2,78 \text{ h}$$

Tal com es pot observar, el temps de residència està dins dels límits de temps establert per a un cristal·litzador d'aquestes característiques, entre 2 i 6 hores.

Així doncs el volum del líquid al cristal·litzador es calcula com es mostra a continuació:

$$V = Q \cdot \tau \quad \text{Equació 12.9.6.9}$$

on:

V=volum ( $\text{m}^3$ )

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

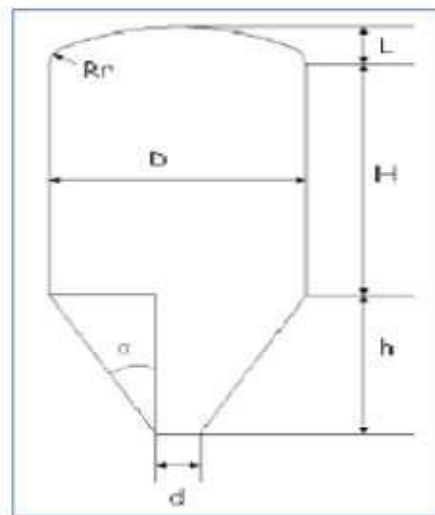
$\tau$ = temps de cristal·lització (h)

$$V = 0,40 \cdot 2,78 = 1,12 \text{ m}^3$$

Es fa un sobredimensionament d'aquest volum, 25 % més, per tal d'assegurar que hi càpiga tota la carrega.

$$V_{\text{sobredimensionat}} = 1,12 \cdot 1,25 = 1,40 \text{ m}^3$$

Tenint aquest volum sobredimensionat, es realitza un dimensionament tenint en compte que el cristal·litzador ha de disposar d'un fons cònic per afavorir la sortida del magma, per la part inferior, ja que aquest té una altra concentració de sòlids. Aquestes dimensions tenen com a restriccions inicials que l'alçada del fons cònic sigui igual a 1/3 de l'alçada del líquid a la part cilíndrica i que l'alçada del líquid de la part cilíndrica sigui igual al diàmetre del cristal·litzador. Amb tot això i les equacions descrites a continuació s'aplica un "solver", variant l'alçada del líquid del cilindre per que la suma dels volums de líquid de la part cònica i la part cilíndrica sigui igual al volum de líquid sobredimensionat del reactor, obtenint una alçada de 1,16 m.



**Figura 12.9.6.2** Esquema de les dimensions del cristal·litzador dissenyat

Per calcular el volum del líquid al cilindre:

$$V_{\text{líquid cilindre}} = \pi \cdot \left(\frac{D}{2}\right)^2 \cdot H \quad \text{Equació 12.9.6.10}$$

$$V_{\text{liquid cilindre}} = \pi \cdot \left(\frac{1,16}{2}\right)^2 \cdot 1,16 = \mathbf{1,23 m^3}$$

on:

D = diàmetre del cilindre

H = alçada del cilindre

Tenint en compte que aquest volum només te en compte el líquid que hi haurà al cristal·litzador es fa un sobredimensionat de l'alçada del líquid perquè hi càpiguen els gasos evaporats, d'un 20 %, obtenint un valor de 1,40, a més a més i tenint en compte que es econòmicament més viable utilitzar una alçada normalitzada s'ha decidit que l'alçada final del cilindre sigui igual a 2 m. Amb això es calcularà el volum del cilindre:

$$V_{\text{cilindre}} = \pi \cdot \left(\frac{1,16}{2}\right)^2 \cdot 2,0 = \mathbf{2,12 m^3}$$

Per calcular el volum del tronc cònic

$$V_{\text{tronc cònic}} = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot h \cdot \left(\frac{D^2}{4} + \frac{d^2}{4} + \frac{D \cdot d}{4}\right) \quad \text{Equació 12.9.6.11}$$

$$V_{\text{tronc cònic}} = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot 0,39 \cdot \left(\frac{1,16^2}{4} + \frac{0,23^2}{4} + \frac{1,16 \cdot 0,23}{4}\right) = \mathbf{0,17 m^3}$$

on:

d = diàmetre del fons cònic

h = alçada del tronc cònic. Calculat com:

$$h = \frac{D-d/2}{\tan(\alpha)} \quad \text{Equació 12.9.6.12}$$

on:

$$\alpha = 30^\circ$$

$$h = \frac{1,16 - 0,23/2}{\tan(30)} = \mathbf{0,39 m}$$

Obtenint un volum final igual a

$$V_{\text{final}} = V_{\text{cilindre}} + V_{\text{tronc cònic}} = 2,13 + 0,17 = \mathbf{2,30 m^3}$$



### 12.9.6.3.2 Disseny mitja canya

Per a realitzar el bescanvi de calor dels cristal·litzadors s'ha escollit aquest mètode de escalfament degut a que la instal·lació de un serpenti a l'interior del cristal·litzador podria provocar incrustacions no desitjades que portarien al mal funcionament de l'equip. Per la mitja canya haurà de circular el cabal d'oli tèrmic calculat anteriorment en el balanç d'energia. Les velocitats típiques de líquid per l'interior de la mitja canya estan entre 2 i 5 m/s per assegurar que el coeficient de transferència de matèria no es veu afectat degut a una velocitat molt baixa i que les pèrdues de carrega no seran molt elevades degut a una velocitat molt alta. Així doncs caldrà calcular el diàmetre intern de la mitja canya per treballar amb una velocitat del oli tèrmic de 3 m/s.

$$v_{oli} = \frac{m_{oli}/\rho_{oli}}{\text{Àrea de pas}} = \frac{m_{oli}/\rho_{oli}}{\frac{(\frac{\pi}{4} \cdot D_i^2)}{2}} \quad \text{Equació 12.9.6.13}$$

Aïllant el diàmetre de l'equació queda:

$$D_i = \sqrt{\frac{m_{oli}/\rho_{oli} \cdot 4 \cdot 2}{\pi \cdot v_{oli}}} \quad \text{Equació 12.9.6.14}$$

on:

$v$ = velocitat oli tèrmic (m/s). Es fixa a 3 m/s

$m_{oli}$ = cabal màssic oli tèrmic (kg/s)

$\rho_{oli}$ = densitat oli tèrmic (kg/m<sup>3</sup>)

$D_i$ = diàmetre intern mitja canya (m)

$$D_i = \sqrt{\frac{1,95/835 \cdot 8}{\pi \cdot 3}} = \mathbf{0,044 \text{ m}}$$

S'utilitzara una mitja canya d'un diàmetre intern de 0,045 m

La longitud requerida de la mitja canya amb el diàmetre escollit, considerant que es sobredimensiona un 25% l'àrea de bescanvi mínima requerida, es calcula amb l'equació següent:

$$L = \frac{A_{req} \cdot 1,25}{D_i} \quad \text{Equació 12.9.6.15}$$

on:

$A_{req}$ = Àrea de bescanvi mínima requerida ( $m^2$ )

$D_i$  = Diametre intern mitja canya (m)

$$L = \frac{0,75 \cdot 1,25}{0,045} = \mathbf{48,04\ m}$$

El numero de voltes vindrà donat per el diametre del cristallitzador i es calcula com es mostra a continuació:

$$n^{\circ}\ voltes = \frac{L}{\pi \cdot D} \quad \text{Equació 12.9.6.16}$$

on:

L= longitud de la mitja canya (m)

D= diametre del cilindre (m)

$$n^{\circ}\ voltes = \frac{48,04}{\pi \cdot 1,55} = 9,88 \approx \mathbf{10\ voltes}$$

Per tal de que la mitja canya ocupi tota la altura del líquid en el cilindre (H) es deixa un espai entre voltes, aquest espai es calcula amb l'equació següent:

$$\text{espai entre voltes} = \frac{H - (D_e \cdot n^{\circ}\ voltes)}{n^{\circ}\ voltes} \quad \text{Equació 12.9.6.17}$$

on:

H= Alçada del líquid (m)

$D_e$ = Diemetre extern, considerant un gruix de la chapa de 1,5 mm

$$\text{espai entre voltes} = \frac{1,55 - (0,048 \cdot 10)}{10} = \mathbf{0,10\ m}$$

Per evitar que la mitja canya quedi per sobre del nivell del líquid en el cas que aquest disminueixi, es deixara un espai de 0,10 m entre cada volta.

#### 12.9.6.4 Disseny mecànic

Es realitza el disseny mecànic del cristal·litzador tenint en conte el ja esmentat en el apartat 12.9.4.4

##### 12.9.6.4.1 Càlcul d'espessors

Aquest càlcul dependrà de la forma del recipient que es vol dissenyar, per al cas dels cristal·litzadors es dissenyaran recipients cilíndrics i recipients cònics.

12.9.6.4.1.1 Cos cilíndricDisseny a pressió interna

$$t = \frac{P \cdot R}{S \cdot E - 0,6 \cdot P} + C.A. \quad \text{Equació 12.9.6.20}$$

on:

t= espessor de la paret (mm)

P= pressió de disseny o pressió màxima de treball permesa (bar)

S= valor esforç del material (bar)

E= eficiència de la junta

R= radi interior (mm)

C.A.= sobreessor (mm)

El sobreessor per corrosió del material és de 0,508 mm/any com a màxim, suposant que la vida útil del reactor seran 15 anys el sobreessor serà 7,62 mm.

$$t = \frac{2,27 \cdot 580,72}{1082,46 \cdot 0,85 - 0,6 \cdot 2,27} = 1,43 + 7,62 = 9,05 \text{ mm}$$

Per calcular la t comercial aquest valor s'arrodonirà al primer gruix de xapa comercial superior.

$$t_{comercial} = 10 \text{ mm}$$

Disseny a pressió externa

Com que l'equip treballa al buit caldrà assegurar-se que la xapa te el gruix suficient per a suportar la pressió externa, per això es calcula la pressió externa màxima amb la següent equació:

$$P_{e.max} = \frac{4 \cdot B}{3 \cdot D_0 / t} \quad \text{Equació 12.9.6.21}$$

on:

$P_{e.max}$ = Pressió externa màxima permesa (psi).

B=Factor B. Es calcula gràficament.

$D_0$ = Diàmetre exterior (mm)

t= Espessor de la xapa (mm)

Primer de tot cal suposar un gruix per a la xapa, en aquest cas, el gruix calculat en el disseny a pressió interna no es suficient per a aguantar la pressió externa, a continuació es mostren els càlculs per a el gruix de xapa mínim per a que la pressió externa màxima permesa sigui superior a la màxima de disseny (15 psi)

El valor de  $t$  utilitzat serà el gruix del la xapa nova menys el gruix afegit per corrosió ja que d'aquesta manera ens assegurem que en el pitjor dels casos, quan s'ha oxidat el màxim calculat, la xapa pugui aguantar la pressió.

$$t = t_{nova} - CA1 = 15 - 7,62 = \mathbf{7,38\ mm}$$

Per al càlcul del factor B es segueix el procediment següent:

1. Es determina el valor de les relacions  $L/D_0$  i  $D_0/t$
2. S'agafa el valor de  $L/D_0$  (1,28) i amb la figura 12.9.6.4 es segueix horitzontalment fins la línia del gràfic amb el valor de  $D_0/t$  (211) . Des de el punt d'intersecció es segueix verticalment per a determinar el factor A.

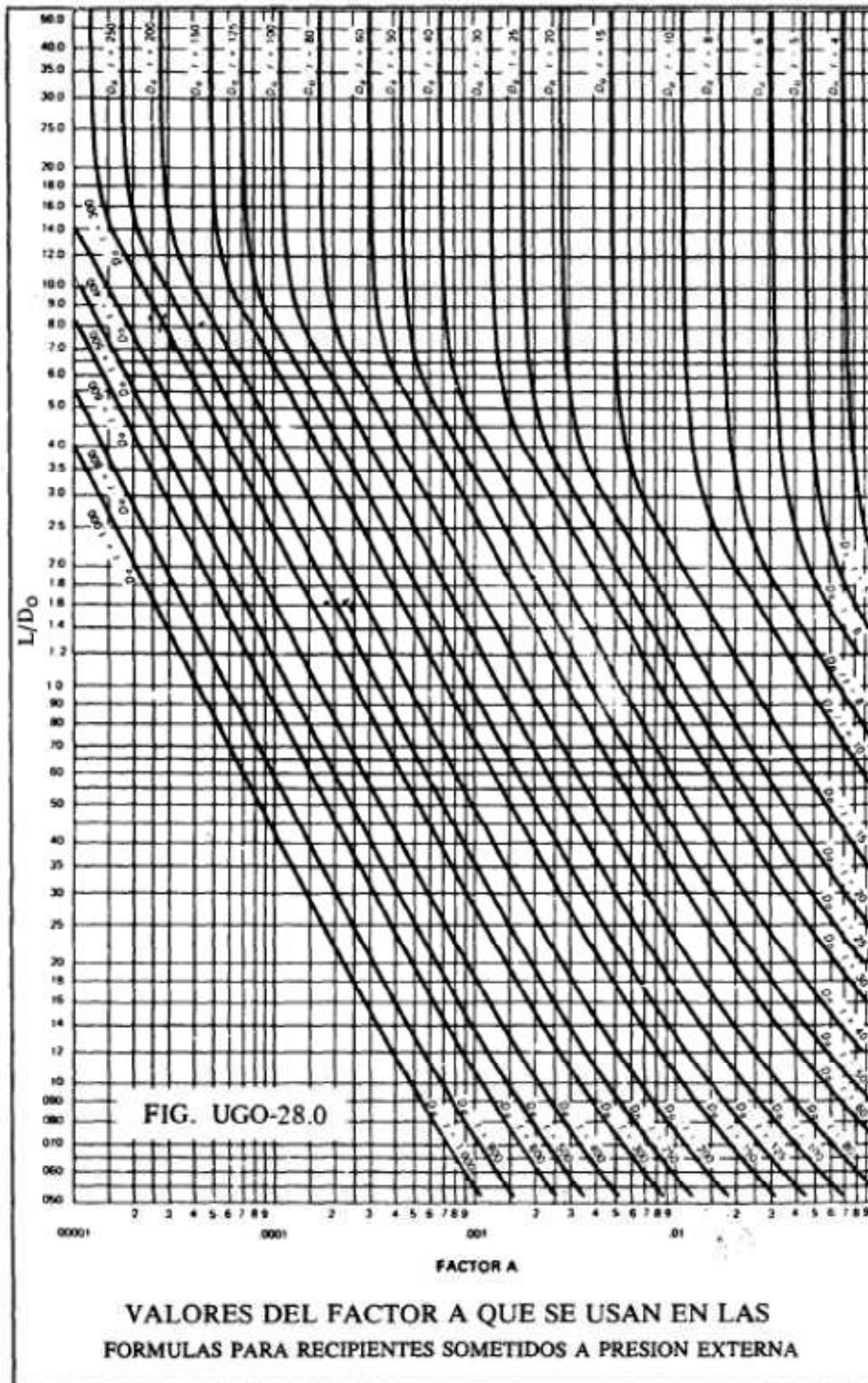


Figura 12.9.6.4 Figura utilitzada per a determinar el valor del factor A.

El valor obtingut del factor A es de 0,00035.

3. A la figura 12.9.6.5 s'agafa el valor del factor A i es segueix verticalment fins a la línia de temperatura de disseny (185°F) , des de la intersecció es segueix horitzontalment fins a trobar el valor del factor B.

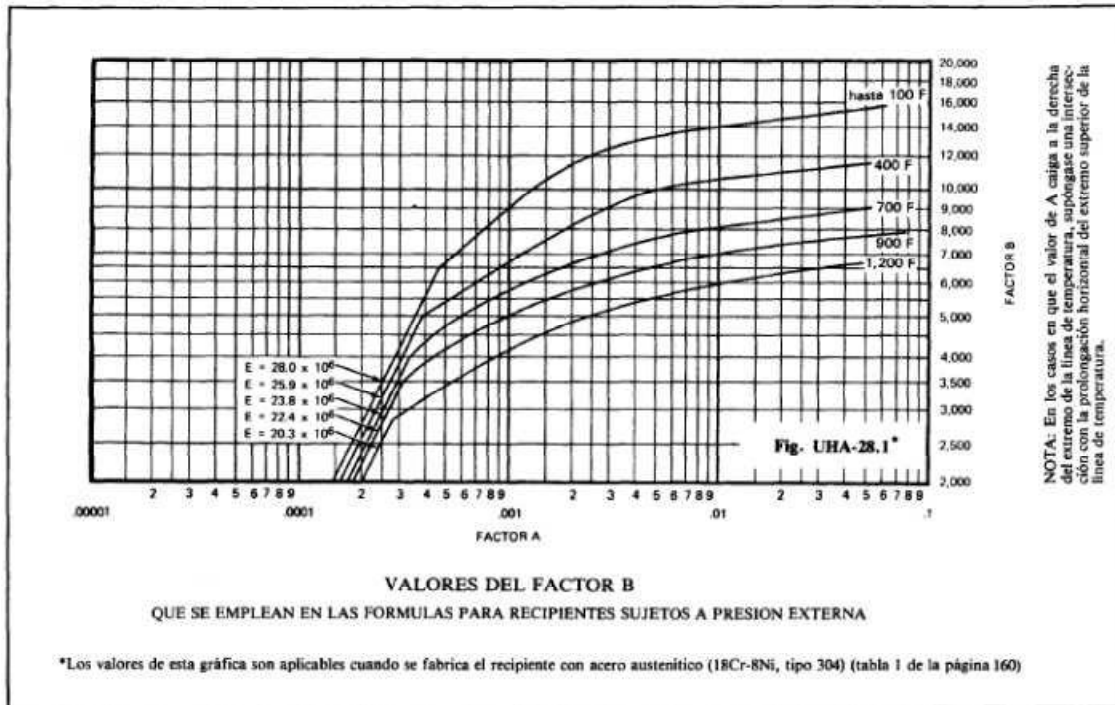


Figura 12.9.6.5 Figura utilitzada per a determinar el valor del factor B.

El valor obtingut gràficament del factor B es de 5000.

Així doncs la pressió màxima permesa serà:

$$P_{e,max} = \frac{4 \cdot 5000}{3 \cdot 211,65} = 46,01 \text{ psi} = 3,17 \text{ atm}$$

Com que la pressió màxima permesa és superior a la pressió de disseny (15 psi) el gruix indicat per al tronc cònic es de 15 mm.

Amb aquest gruix trobem una pressió màxima interna d'operació amb la següent equació

$$P = \frac{S \cdot E \cdot t}{R + 0,6 \cdot t} \quad \text{Equació 12.9.6.22}$$

on:

t= espessor de la paret (mm)

P= pressió de disseny o pressió màxima de treball permesa (bar)

E= eficiència de la junta

R= radi interior (mm)

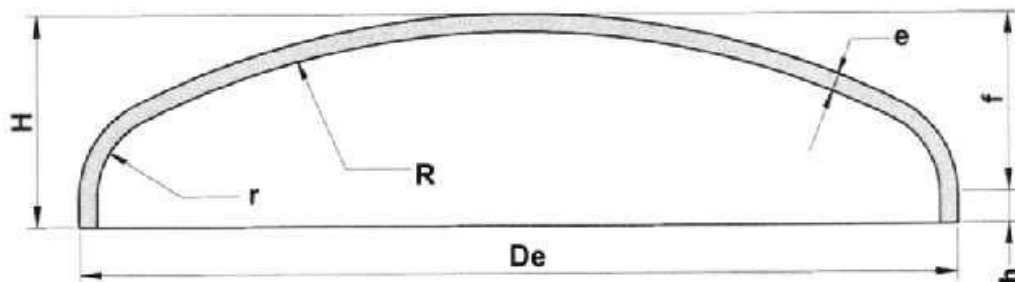
S= valor del esforç del material (bar)

$$P = \frac{1082,46 \cdot 0,85 \cdot 15}{580,72 + 0,6 \cdot 15} = 23,4 \text{ bar}$$

#### 12.9.6.4.1.2 Capçal toriesfèric

##### Disseny a pressió interna

Els tipus de capçals més utilitzats són el toriesfèric, l'hemisfèric i l'el·lipsoïdal, en aquest cas s'utilitza el toriesfèric ja que és el més comú en la indústria química.



**Figura 12.9.6.6** Esquema de les dimensions d'un capçal tipus toriesfèric.

Aquest capçal ve definit pel radi de la corona (L) i el radi del colze (r) que es calculen respecte al diàmetre intern de la carcassa:

$$L = D = 1161,14 \text{ mm}$$

$$r = 0,1 \cdot D = 116,14 \text{ mm}$$

$$\frac{L}{r} = 10$$

Per una relació R/r menor de 16,67 l'espessor es calcula amb l'expressió següent:

$$t_f = \frac{P \cdot L \cdot M}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad \text{Equació 12.9.6.23}$$

on:

$t_f$  = espessor del capçal (mm)

P = pressió de disseny del recipient (bar)

M = factor que depèn de la relació R/r, en aquest cas igual a 1,54

E = factor de soldadura (radiografiat doble parcial)

S = càrrega admissible del material (bar)

$C_1$  = marge per corrosió (mm)

$C_2$  = tolerància de fabricació (mm)

$$t_f = \frac{2,27 \cdot 1161,43 \cdot 1,54}{2 \cdot 1082,46 \cdot 0,85 - 0,2 \cdot 2,27} + 7,62 + 0,22 = 10,05 \text{ mm}$$

Finalment el valor de l'espessor dels capçals, evitant costos de fabricació específics:

$$\text{espessor dels capçals} = 12 \text{ mm}$$

### Disseny a pressió externa

Com que l'equip treballa al buit caldrà assegurar-se que la xapa té el gruix suficient per a suportar la pressió externa, per això es calcula la pressió externa màxima amb la següent equació:

$$P_{e.max} = \frac{B}{L_0/t} \quad \text{Equació 12.9.6.24}$$

on:

$P_{e.max}$  = Pressió externa màxima permesa (psi)

B=Factor B. Es calcula gràficament.

$L_0$  = Radi exterior de la peça (mm)

t= Espessor de la xapa (mm)

Primer de tot cal suposar un gruix per a la xapa, en aquest cas, el gruix calculat en el disseny a pressió interna no és suficient per a aguantar la pressió externa, a continuació es mostren els càlculs per a el gruix de xapa mínim per a que la pressió externa màxima permesa sigui superior a la màxima de disseny (15 psi)

$$t = t_{nova} - CA1 - CA2 = 15 - 7,62 - 0,298 = 7,08 \text{ mm}$$



on:

$t_{nova}$  = espessor de la xapa comercial (mm)

CA1= gruix per corrosió (mm)

CA2= tolerància per la curvatura de la peça (mm)

Per al càlcul del factor B es segueix el procediment següent:

1. Calcular el valor de A amb l'equació següent:

$$2. A = \frac{0,125}{L_0/t} \quad \text{Equació 12.9.6.25}$$

on:

$L_0$  = Radi exterior de la peça (45,73 mm)

A= factor A

t= gruix de la xapa (mm)

$$A = \frac{0,125}{60,92/7,08} = 0,0006$$

3. A la figura 12.9.6.4 s'agafa el valor del factor A i es segueix verticalment fins la línia de temperatura de disseny (185°F) , des de la intersecció es segueix horitzontalment fins a trobar el valor del factor B. En aquest cas el valor obtingut de B és de 6750.

Així doncs la pressió externa màxima permesa és:

$$P_{e.max} = \frac{5200}{60,92/7,08} = 30,89 \text{ psi} = \mathbf{2,13 \text{ bar}}$$

La pressió externa màxima permesa és superior a la pressió externa de disseny, per tant, el gruix de la xapa ha de ser de 15 mm.

Amb aquest gruix trobem una pressió màxima interna d'operació amb la següent equació

$$P = \frac{2 \cdot S \cdot E \cdot t}{L \cdot M + 0,2 \cdot t} \quad \text{Equació 12.9.6.26}$$

on:

t= espessor de la paret (mm)

P= pressió de disseny o pressió màxima de treball permesa (bar)

E= eficiència de la junta

L= radi interior del casquet (mm)

M= factor adimensional

S= valor del esforç del material (bar)

$$P = \frac{2 \cdot 1082,46 \cdot 0,85 \cdot 15}{1161,43 \cdot 1,54 + 0,2 \cdot 15} = \mathbf{15,41 \text{ bar}}$$

#### 12.9.6.4.1.3 Secció cònica

##### Disseny a pressió interna

$$t = \frac{P \cdot D}{2 \cdot \cos \alpha \cdot (S \cdot E - 0,6 \cdot P)} + C.A. \quad \text{Equació 12.4.6.27}$$

on:

t= espessor de la paret (mm)

P= pressió de disseny o pressió màxima de treball permesa (bar)

S= valor esforç del material (bar)

E= eficiència de la junta

D= diàmetre interior (mm)

$\alpha$ = la meitat del angle en el vèrtex (graus)

C.A.= sobreessessor (mm)

$$t = \frac{2,32 \cdot 1161,43}{2 \cdot \cos 30 \cdot (1082,46 \cdot 0,85 - 0,6 \cdot 2,32)} = 1,70 + 7,62 = 9,31 \text{ mm}$$

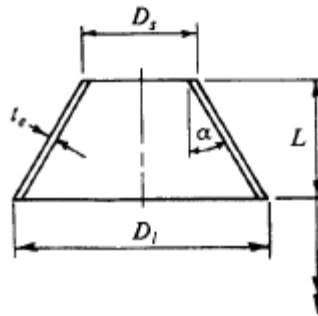
Per calcular la t comercial aquest valor s'arrodonirà al primer gruix de xapa comercial superior.

$$t_{\text{comercial}} = \mathbf{10 \text{ mm}}$$

##### Disseny a pressió externa

Com que l'equip treballarà al buit cal comprovar que el gruix calculat per a pressió interna serà suficient per a aguantar la pressió externa de disseny que serà igual a la pressió atmosfèrica (15 psi).

A la figura 12.9.6.7 es mostra la notació que s'utilitzarà per a definir les mides del fons cònic i que s'utilitzaran a les formules.



**Figura 12.9.6.7** Notació utilitzada per a les mides del fons cònic

$D_s$ = Diàmetre exterior a l'extrem petit ( 318,21 mm)

$D_l$ = Diàmetre exterior a l'extrem gran (1556 mm)

$L$ = Longitud del con (515,75 mm)

$\alpha$ = La mitat de l'angle al vèrtex ( $30^\circ$ )

$t_e$ = Espessor efectiu de la xapa (mm).  $t_e = t \cdot \cos \alpha$

La pressió externa màxima permesa es calcula de la següent manera:

$$P_{e.max} = \frac{4 \cdot B}{3 \cdot D_l / t_e} \quad \text{Equació 12.9.6.28}$$

on:

$P_{e.max}$ = Pressió externa màxima permesa (psi)

$B$ =Factor B. Es calcula gràficament.

$D_l$ = Diàmetre exterior en l'extrem gran (mm)

$t_e$ = Espessor efectiu de la xapa (mm)

Primer de tot cal suposar un gruix per a la xapa, aquest serà el obtingut en el disseny a pressió interna menys el gruix afegit per corrosió (7,62 mm) ja que d'aquesta manera ens assegurem que en el pitjor dels casos, quan s'ha oxidat el màxim calculat, la xapa pugui aguantar la pressió.

$$t_e = t_{nova} - CA1 \cdot \cos \alpha = 12 - 7,62 \cdot \cos 30 = 3,79 \text{ mm}$$

Per al càlcul del factor B es segueix el procediment següent:

1. Es calcula la longitud equivalent de la secció cònica com:

$$2. L_e = \frac{L}{2} \cdot 1 + \frac{D_s}{D_l} \quad \text{Equació 12.9.6.29}$$

3. Es determina el valor de les relacions  $L_e/D_l$  i  $D_l/t_e$ .
4. S'agafa el valor de  $L_e/D_l$  (0,2) ( $L/D_0$  en el gràfic) i amb la figura 12.9.6.4 es segueix horitzontalment fins la línia del gràfic amb el valor de  $D_l/t_e$  (410) ( $D_0/t$  al gràfic). Des de el punt d'intersecció es segueix verticalment per a determinar el factor A.

El valor obtingut del factor A es de 0,0009.

5. A la figura 12.9.6.5 s'agafa el valor del factor A i es segueix verticalment fins la línia de temperatura de disseny (185°F) , des de la intersecció es segueix horitzontalment fins a trobar el valor del factor B.

El valor obtingut gràficament del factor B es de 8000.

Així doncs la pressió màxima permesa serà:

$$P_{e.max} = \frac{4 \cdot 8000}{3 \cdot 410} = 26 \text{ psi} = \mathbf{1,79 \text{ bar}}$$

Com que la pressió màxima permesa és superior a la pressió de disseny (15 psi) el gruix indicat per al tronc cònic es de 15 mm.

Amb aquest gruix trobem una pressió màxima interna d'operació amb la següent equació

$$P = \frac{2 \cdot S \cdot E \cdot t \cdot \cos \alpha}{D + 1,2 \cdot t \cdot \cos \alpha} \quad \text{Equació 12.9.6.30}$$

on:

t= espessor de la paret (mm)

P= pressió de disseny o pressió màxima de treball permesa (bar)

E= eficiència de la junta

D= diàmetre interior (mm)

S= valor del esforç del material (bar)

$\alpha$ = la meitat del angle en el vèrtex (graus)

$$P = \frac{2 \cdot 1082,46 \cdot 0,85 \cdot 15 \cdot \cos 30}{1161,43 + 1,2 \cdot 15 \cdot \cos 30} = 20,31 \text{ bar}$$

#### 12.9.6.4.2 Pes de l'equip

##### Pes de l'equip buit

El pes del equip buit es calcula tenint en compte el cos cilíndric, la secció cònica i el capçal toriesfèric amb les equacions següents.

$$M_{\text{cos cilíndric}} = \rho_{\text{material}} \cdot A_{\text{interna cos cilíndric}} \cdot t \quad \text{Equació 12.9.4.31}$$

$$M_{\text{capçal toriesfèric}} = \rho_{\text{material}} \cdot (V_{\text{extern toriesfèric}} - V_{\text{intern toriesfèric}}) \quad \text{Equació 12.9.4.32}$$

$$M_{\text{secció cònica}} = \rho_{\text{material}} \cdot (V_{\text{extern con}} - V_{\text{intern con}}) \quad \text{Equació 12.9.4.33}$$

$$M_{\text{mitja canya}} = \rho_{\text{material}} \cdot \frac{\pi \cdot D_{\text{intern mitja canya}} \cdot L}{2} \cdot t_{\text{mitja canya}} \quad \text{Equació 12.9.4.34}$$

on:

M = Pes (kg)

A= area (m<sup>2</sup>)

t = Espessor del material (m)

$\rho_{\text{material}}$ = Densitat del material (7800 Kg/m<sup>3</sup>)

V= Volum (m<sup>3</sup>)

$$V_{\text{extern toriesfèric}} = 0,0809 \cdot (D_{\text{cilindre}} + 2 \cdot t)^3 \quad \text{Equació 12.9.4.35}$$

$$V_{\text{intern toriesfèric}} = 0,0809 \cdot D_{\text{cilindre}}^3 \quad \text{Equació 12.9.4.36}$$

$$V_{\text{extern con}} = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot h \cdot \left( \frac{(D_{\text{extern}}+t)^2}{4} + \frac{(d_{\text{extern}}+t)^2}{4} + \frac{(D_{\text{extern}}+t) \cdot (d_{\text{extern}}+t)}{4} \right) \quad \text{Equació 12.9.4.37}$$

12.9.4.37

$$V_{\text{intern con}} = \frac{1}{3} \cdot \pi \cdot h \cdot \left( \frac{D_{\text{intern}}^2}{4} + \frac{d_{\text{intern}}^2}{4} + \frac{D_{\text{intern}} \cdot d_{\text{intern}}}{4} \right) \quad \text{Equació 12.9.4.38}$$

$$M_{\text{cos cilíndric}} = 7800 \cdot 1,88 \cdot 0,015 = 220 \text{ kg}$$

$$M_{\text{capçal toriesfèric}} = 7800 \cdot (0,324 - 0,300) = 186 \text{ kg}$$

$$M_{\text{secció cònica}} = 7800 \cdot (0,41 - 0,40) = 70,85 \text{ kg}$$

$$M_{\text{mitja canya}} = 7800 \cdot \frac{\pi \cdot 0,045 \cdot 48,04}{2} \cdot 0,0015 = 8,17 \text{ kg}$$

Es considera un 10% més de material per tal de tenir en compte soldadures, cargols, brides i similar, essent el pes final de l'equip buit:

$$M_{\text{buit total}} = 1,1 \cdot (220 + 186 + 70,85 + 8,17) = \mathbf{485,02}$$

#### Pes del cristal·litzador en operació

El pes en operació vindrà donat per la suma del equip buit més el volum de magma a l'interior del cristal·litzador, el pes del vapor que circula per la mitja canya es considera menyspreable.

$$M_{\text{equip operació}} = M_{\text{equip buit}} + V_{\text{líquid}} \cdot \rho_{\text{magma}} + V_{\text{oli tèrmic}} \cdot \rho_{\text{oli tèrmic}} \quad \text{Equació}$$

#### 12.9.6.39

$$M_{\text{equip operació}} = 485,02 + 3,31 \cdot 945,57 + 0,038 \cdot 850 = \mathbf{3647,32 \text{ kg}}$$

#### Pes del cristal·litzador amb aigua

El pes del cristal·litzador en condicions de prova ve donat per la suma de l'equip buit i el seu interior ple d'aigua.

$$M_{\text{equip prova}} = M_{\text{equip buit}} + V_{\text{líquid}} \cdot \rho_{\text{magma}} \quad \text{Equació 12.9.6.40}$$

$$M_{\text{equip prova}} = 485,02 + 3,31 \cdot 1000 = \mathbf{3795 \text{ kg}}$$

- Espessor de l'aïllant: Degut a que la temperatura de la carcassa és superior a 60°C (65°C) cal aïllar l'equip amb llana de roca. L'espessor d'aquest aïllant es pot calcular com:

$$X = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{\Delta T}{D_{\text{ext}}}\right)^{\frac{1}{4}}} \quad \text{Equació 12.9.6.41}$$

on:

X = espessor de l'aïllant (cm)

$\Delta T$  = diferència de temperatura entre l'interior i l'exterior del recipient (65 - 15)°C = 50.

$D_{ext}$  = diàmetre exterior del recipient (m)

$$X = \frac{30}{3,6 \cdot \left(\frac{50}{1,58}\right)^{\frac{1}{4}}} = 3,51 \text{ cm}$$

Aquest aïllant quedarà recobert per una capa d'alumini per tal de protegir-lo de les inclemències meteorològiques.

El volum de l'aïllant es determina per poder-ne calcular el preu amb l'expressió següent:

$$V_{aïllant} = (A_{externa \text{ cos cilíndric}} + A_{externa \text{ con}}) \cdot X_{aïllant} \quad \text{Equació 12.9.6.42}$$

$$A_{externa \text{ cos cilíndric}} = \pi \cdot D_{extern \text{ cilindre}} \cdot H_{líquid} = \pi \cdot 3,51 \cdot 1,55 = 7,67 \text{ m}^2$$

$$A_{externa \text{ con}} = \pi \cdot (R + r) \cdot g = \pi \cdot (0,77 + 0,15) \cdot 0,32 = 6,08 \text{ m}^2$$

on:

A= Àrea (m<sup>2</sup>)

X= espessor de l'aïllant (m)

R= radi exterior a l'extrem gran (m)

r= radi exterior a l'extrem petit (m)

$$g = \text{generatriu del con} = \sqrt{h^2 + (R - r)^2} = 0,32 \text{ m}$$

$$V_{aïllant} = 0,30 \text{ m}^3$$

### 12.9.7 Generació de buit

Els cristal·litzadors CR-601, CR-602 i CR-603 treballen a una pressió de buit de 0,16 bar, aquesta pressió permet evaporar el toluè a una temperatura inferior a la que caldria a pressió atmosfèrica. La solubilitat del Carbaryl es funció de la quantitat de dissolvent i es directament proporcional a la temperatura, es per això, que ens

interessa eliminar el toluè però a la vegada treballar a baixes temperatures on el Carbaryl serà menys soluble i serà més fàcil la seva cristal·lització. La manera de aconseguir la evaporació del dissolvent i a la vegada treballar a una temperatura el mes baixa possible s'aconsegueix amb la generació de buit al cos del cristal·litzador.

Per a la generació d'aquest buit s'ha decidit utilitzar bombes de buit d'anell líquid, aquestes utilitzen l'aigua com a font d'energia per a la compressió del gas, l'aigua es bombeja a la bomba on fa girar un rotor de paletes i aquestes actuen com a un pistó per comprimir i descarregar el gas generant d'aquesta manera el buit.

Per a l'elecció de la bomba de buit cal fixar-nos en el volum en el que es requereix fer el buit, aquest serà el volum buit dels tres cristal·litzadors i el volum de conduccions des de els cristal·litzadors fins la bomba de buit.

$$V_{buit} = V_{cilindres\ buit} + V_{capçals\ toriesfèrics} \quad \text{Equació 12.9.7.1}$$

on:

V= Volum ( $m^3$ )

$$V_{buit} = 19,63 + 4,40 = 24,03 \text{ m}^3$$

A més a més del volum dels cristal·litzadors s'ha de tenir en compte el volum de les conduccions que van dels cristal·litzadors al condensador, per això es sobredimensiona el volum on volem fer el buit un 20%:

$$V_{buit} = 24,03 \cdot 1,20 = \mathbf{28,8 \text{ m}^3}$$

El cabal de la bomba de buit és funció del temps per fer el buit i la pressió final que es vol assolir, aquest es calcula amb l'equació següent:

$$Q = \frac{V}{t} \cdot \ln\left(\frac{P_1}{P_2}\right) \quad \text{Equació 12.9.7.2}$$

on:

Q= cabal de al bomba de buit ( $m^3/h$ )

V= Volum on es vol fer el buit ( $m^3$ )

t= temps per fer el buit (h)

P<sub>1</sub>= Pressió atmosfèrica (bar)

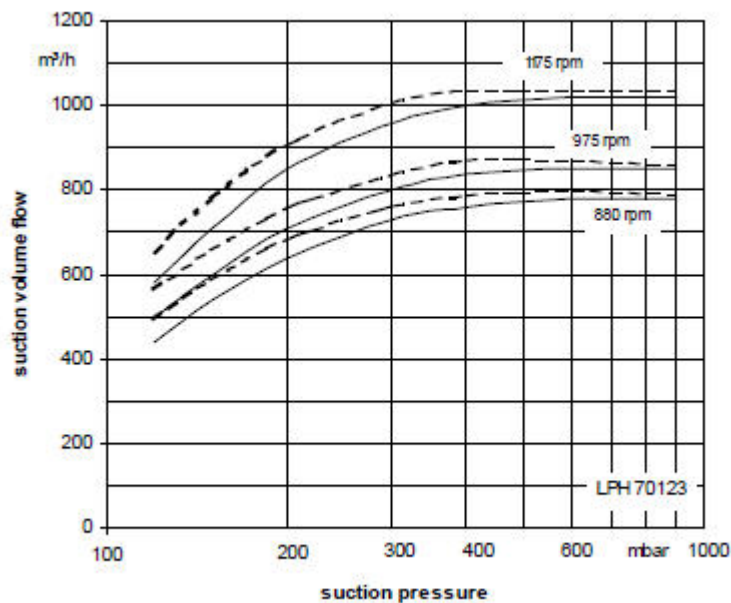
P<sub>2</sub>= Pressió final de buit (bar)



$$Q = \frac{V}{0,083} \cdot \ln\left(\frac{1}{0,16}\right) = \frac{28,8}{0,083} \cdot \ln\left(\frac{1}{0,16}\right) = 635,88 \text{ m}^3/\text{h}$$

Amb aquets requeriments s'ha escollit una bomba de buit de la casa STERLING SIHI concretament el model LPH 70123.

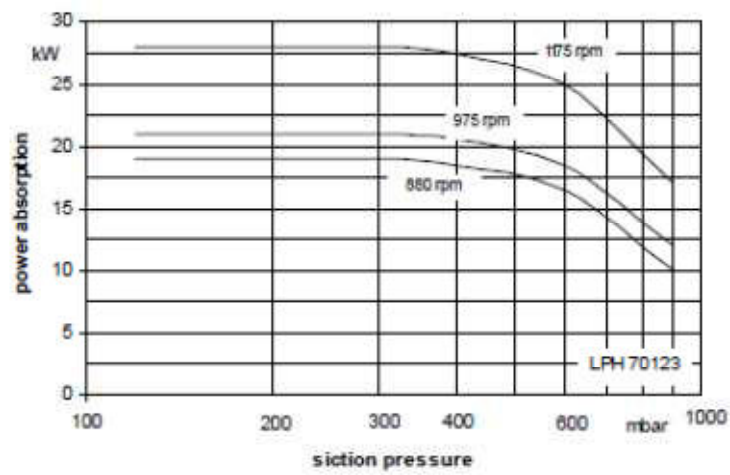
Del catàleg del proveïdor és pot cel·lular la potència requerida per la bomba de buit. En primer lloc amb la pressió a la succió de la bomba de buit i el cabal es calcula les revolucions per minut a les que haurà de treballar amb la següent figura:



**Figura 12.9.7.1 Cabal de succió vs. Pressió de succió de bomba de buit LPH 70123**

La bomba de buit treballarà a 975rpm.

Un cop calculades les revolucions per minut a les que haurà de treballar la bomba es calcula la potència amb la següent figura:



**Figura 12.9.7.2 Potència vs. Pressió de succió**

La potència necessària de la bomba de buit serà de 21KW.

## 12.10 DISSENY DE CENTRÍFUGUES

Les centrífugues s'utilitzen per separar partícules fines i petites gotes de líquids. L'equació del moviment d'una partícula que es desplaça en un fluid sota l'acció d'un camp centrífug, serà semblant a la del desplaçament d'una partícula en un camp gravitatori, exceptuant que la acceleració de la gravetat (g) tindrà que ser substituïda per l'acceleració centrífuga ( $r \cdot \omega^2$ ), on r es el radi de gir i  $\omega$  es la velocitat angular.

Una mida del poder de separació d'una centrífuga serà la relació entre l'acceleració centrífuga i la gravetat, aquesta relació pot tindre un valor fins 10000 [Coulson i Richardson, 1981].

La velocitat d'una partícula en el si d'un fluid i dins d'una centrífuga pot estudiar-se mitjançant dos components: un radial,  $v_r$ , que serà perpendicular a l'eix de gir, i altra axial,  $v_x$ , que serà paral·lel a l'eix de gir.

Si la concentració de sòlids a l'entrada es suficientment baixa com per que no hi hagi interacció entre les partícules, la velocitat radial vindrà donada per la llei de Stokes degudament modificada, sense tenir en compte els efectes de la acceleració lineal de la partícula.

Per altra part si la concentració de sòlids a l'entrada es alta, llavors la velocitat de sedimentació de les partícules disminueix degut al creixement de la viscositat de la suspensió i de la densitat, les partícules grans son retardades i les petites accelerades.

Per poder trobar un decantador centrífug òptim per els nostres requeriments s'haurà de fer primer un càlcul del cabal volumètric d'entrada total així com del cabal volumètric de entrada de sòlids, aquest es farà tenint en compte la densitat de la mescla.

Els cabals volumètrics d'entrada per al primer decantador seran els següents:

$$Q_{v \text{ total}} = Q_m \cdot \rho = 2545,13 \frac{Kg}{h} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{1049,17 Kg} \cdot \frac{1000 L}{1 \text{ m}^3} = 2425,85 \frac{L}{h}$$

$$Q_{v \text{ sòlids}} = Q_{m \text{ sòlids}} \cdot \rho = 1391,22 \frac{Kg}{h} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{1049,17 Kg} \cdot \frac{1000 L}{1 \text{ m}^3} = 1326,06 \frac{L}{h}$$

Els cabals volumètrics d'entrada per al segon decantador seran els següents:

$$Q_{v \text{ total}} = Q_m \cdot \rho = 259,38 \frac{Kg}{h} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{945,57 Kg} \cdot \frac{1000 L}{1 \text{ m}^3} = 274,31 \frac{L}{h}$$

$$Q_{v \text{ sòlids}} = Q_{m \text{ sòlids}} \cdot \rho = 118,77 \frac{Kg}{h} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{945,57 Kg} \cdot \frac{1000 L}{1 \text{ m}^3} = 125,61 \frac{L}{h}$$

Tenint en compte aquests cabals, s'han escollit els decantadors centrífugs de la marca Peralisi, els models BABY 1 i BABY 2 amb les següents característiques tècniques:

**Taula 12.19.1** Característiques tècniques dels decantadors centrífugs.

	<b>BABY 2</b>	<b>BABY 1</b>
<b>Capacitat nominal (L/h)</b>	2500	1500
<b>Capacitat de sòlids (L/h)</b>	2000	1000
<b>Diàmetre cilindre (mm)</b>	232	353
<b>Longitud cilindre (mm)</b>	780	780
<b>Longitud total (mm)</b>	1860	1660
<b>Alçada total (mm)</b>	1095	1095
<b>Regim de rotació (rpm)</b>	4100	4100
<b>Potència (Kw)</b>	7,5	5,5
<b>Material</b>	AISI 304L	AISI 304L

La mescla sotmesa al procés de separació, es introduïda al cargol d'Arquímedes, el qual actua com a eina transportadora a una velocitat de rotació diferencial (en relació a la del tambor) i produint un moviment lent que permet impulsar els sòlids al lloc de menor diàmetre del con, per un tub d'alimentació central i es va accelerant poc a poc. Aquesta rotació diferencial es decisiva per determinar el temps de retenció del premsat, per lo que la possibilitat d'ajustar-la permet obtenir un producte final amb la millor qualitat possible.

Els sòlids desplaçats pel decantador son expulsats per uns orificis de sortida ubicats en l'extrem cònic del tambor, es aquí, al tambor, on la mescla arriba a la seva màxima velocitat, el que fa que les substàncies sòlides es depositen a la paret interna del mateix.

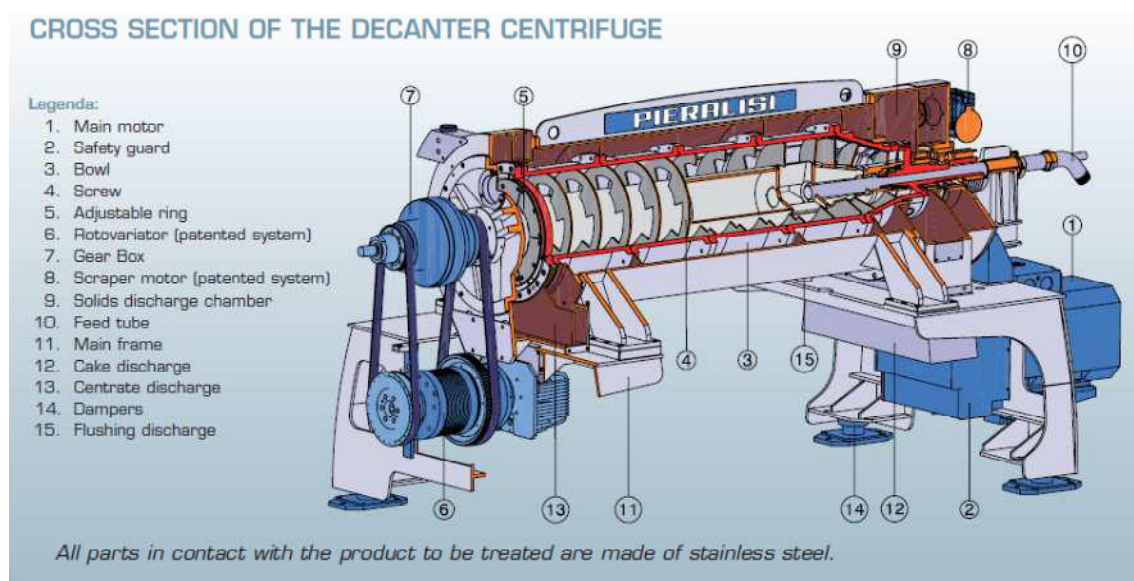
La mida del tambor es mesura en base a la relació existent entre el diàmetre (D) i la longitud (L). Pel que fa la part cònica, aquesta incideix en la capacitat de transport dels sòlids, incidint de forma significativa el pas de la rosca del cargol i del angle del con. En aquests decantadors, la velocitat de rotació al cargol d'Arquímedes determinarà el temps de permanència de les substàncies sòlides en el tambor degut a la diferencia en

la velocitat de rotació, aquest diferencial es decisiu per a la sequedat desitjada dels sòlids i es pot ajustar, en base a la tasca de separació, de forma optima.



**Figura 12.10.1** Cargol d'Arquímedes del decantador centrífug

Pel que fa la descàrrega de líquids, els líquids clarificats flueixen per l'extrem cilíndric del tambor i des d'allà son expulsats a unes sortides on hi han uns anells perfectament ajustats que permeten regular la profunditat del estanc al tambor. Aquest líquid es expulsat sense pressió fins la carcassa de la centrífuga i surt sense pressió del decantador.



**Figura 12.10.2** Esquema del decantador centrífug utilitzat a la planta.

## 12.11 DISSENY DE L'ASSECADOR

En general l'assecatge de sòlids consisteix en separar petites quantitats d'aigua o altres líquids d'un material sòlid per tal de reduir el seu contingut fins un valor acceptablement baix. L'assecat és comunament l'etapa final d'una sèrie de operacions i, sovint, el producte que s'extreu d'un assecador ja es pot empaquetar.

L'aigua o altres líquids poden separar-se dels sòlids de manera mecànica, mitjançant premses o centrífugues, o bé de manera tèrmica, mitjançant evaporació. En general resulta més barat eliminar líquids per mètodes mecànics que per mètodes tèrmics, i per aquesta raó és aconsellable reduir el contingut de líquid tant com sigui possible abans d'alimentar el material a un assecador tèrmic.

El contingut de líquid d'una substància seca varia d'un producte a un altre, el més freqüent és que el producte contingui una mica de líquid però a vegades el producte no el conté, pel que rep el nom de totalment sec. El líquid que s'ha de vaporitzar pot estar sobre la superfície del sòlid, com en l'assecat de vidres salins, completament a l'interior del sòlid, com en el cas d'eliminació del solvent d'una làmina d'un polímer, o part a l'exterior i part a l'interior.

L'alimentació d'alguns assecadors és un líquid en el qual està suspès el sòlid en forma de partícules o en solució i el producte que s'asseca pot suportar temperatures elevades o potser requereixi un tractament suau a temperatures baixes o moderades i els sòlids que s'assequen presenten diferents formes: escates, grànuls, cristalls, pols, fulles o làmines contínues, i posseeixen propietats molt diferents. Això dóna lloc a que al mercat hi hagi un gran nombre de tipus d'assecadors comercials i les diferències resideixen fonamentalment en la manera en què els sòlids es mouen a la zona d'assecat i en la forma en què es transfereix la calor.

No hi ha una forma senzilla de classificar l'equip d'assecatge, alguns assecadors són continus, mentre que altres operen de manera discontinua o per càrregues, alguns mantenen en agitació els sòlids i altres no. Hi ha assecadors que poden operar amb qualsevol tipus de material mentre que altres presenten limitacions a causa de la classe d'alimentació que poden acceptar.

Els equips d'assecatge es classifiquen en:

- Assecadors en què el sòlid es troba directament exposat a un gas calent, generalment aire, reben el nom de assecadors directes o adiabàtics.
- Assecadors en els què la calor és transfereix al sòlid des de un mitjà extern, tal com vapor d'aigua condensat, a través d'una superfície metàl·lica amb la qual el sòlid està en contacte, reben el nom d'assecadors indirectes o no adiabàtics
- Assecadors que són escalfats per energia dielèctrica, radiant o de microones.

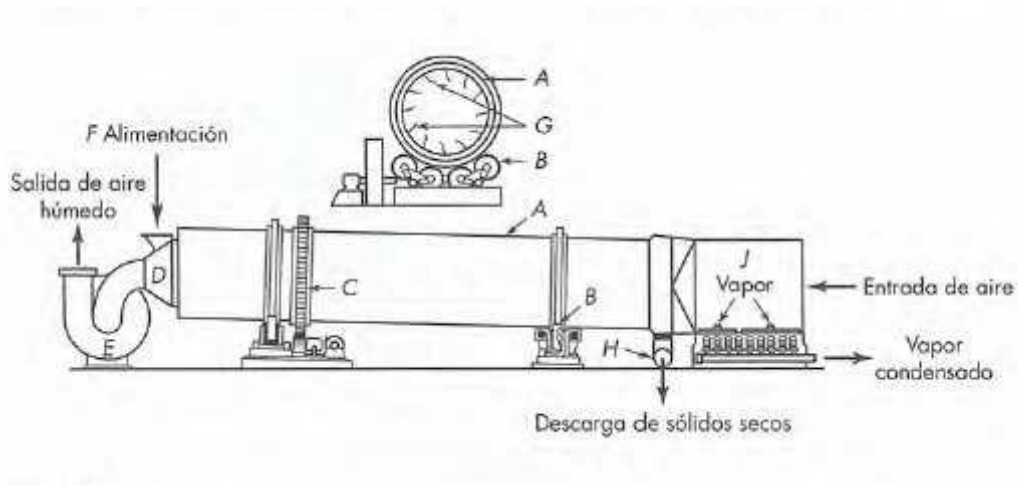
Per al nostre procés s'ha escollit l'assecador de tambor de la empresa GMF GOUDA, el model *single drum dryer*, degut a que es un equip que proporciona una ràpida transferència de calor i massa i a més a més es un equip compacte i de menor mida que altres assecadors. Les dimensions de l'assecador s'han escollit d'acord al cabal de Carbaryl a produir, suposant una freqüència de gir de una revolució i mitja per minut i a més a més un gruix de capa de uns 2 mm, obtenint les següents característiques:

**Taula 12.11.1** Característiques tècniques de l'assecador utilitzat a la planta

<b>Single Drum Dryer Model E</b>	
<b>Area d'assecatge (m2)</b>	6,2
<b>Diàmetre de tambor (mm)</b>	1000
<b>Longitud de tambor (mm)</b>	2000
<b>Numero de rodets</b>	4
<b>Diametre de rodet (mm)</b>	120
<b>Longitud L (m)</b>	4,2
<b>Amplada W (m)</b>	1,8
<b>Alçada H (m)</b>	5,6
<b>Pes (tn)</b>	9,8
<b>Freqüència de gir (rpm)</b>	1,5

Aquest assecador rotatori opera amb aire calent directe a contracorrent. Consta d'una carcassa rotatòria A, construïda amb xapa d'acer, suportada per dos conjunts de rodets B i accionada amb un engranatge i un pinyó C. Hi ha una campana D, a l'extrem superior, que connecta amb una xemeneia mitjançant un ventilador E i una conducció F que introdueix el material humit des de la tolva d'alimentació. Les pestanyes G, eleven el material que s'asseca per després deixar-lo caure a través de la corrent d'aire calent i estan soldades sobre la superfície interior de la carcassa. Per l'extrem inferior de l'assecador es descarrega el producte sec en un transportador de cargol H. L'aire

circula a través de l'assecador mitjançant un ventilador que, si es desitja, descarrega en l'escalfador d'aire, de forma que tot el sistema es troba a sobrepressió.



**Figura 12.11.1** Esquema funcional d'un assecador.

## 12.12 DISSENY D'EQUIPS D'IMPULSIÓ

### 12.12.1 Bombes

#### 12.12.1.1 Balanç d'energia mecànica

Les bombes són equips d'impulsió que proporcionen al fluid que circula per canonada la energia necessària per a que es desplaci d'un punt d'origen al destí final. La energia necessària es calcula fent un balanç d'energia mecànica del sistema.

$$\widehat{W} = g \cdot (z_2 - z_1) + \left( \frac{P_2}{\rho} - \frac{P_1}{\rho} \right) + \frac{1}{2 \cdot \alpha} \cdot (v_2^2 - v_1^2) + \Sigma F m \quad \text{Equació 12.12.1.1}$$

on:

$\widehat{W}$  = Treball per unitat de massa (J/kg)

g= Acceleració de la gravetat (m/s<sup>2</sup>)

z= Altura (m)

P= Pressió (Pa)

$\rho$ = Densitat del fluid (kg/m<sup>3</sup>)

$\alpha$ = Factor de correcció e la velocitat (1)

v= Velocitat del fluid que circula per la canonada (m/s)



$\Sigma F$ = Sumatori de les pèrdues d'energia mecànica provocades pel fregament ( $m^2/s^2$ )

Les pèrdues d'energia mecànica per fregament esta relacionat amb la longitud de la canonada entre el punt inicial i final i el numero d'accidents com poden ser closes, vàlvules, estretaments... Per tant aquest terme es la suma dels dos factors:

$$\Sigma F = \Sigma F_{rectes} + \Sigma F_{accidents} \quad \text{Equació 12.12.1.2}$$

Les pèrdues de carrega per fregament de trams rectes es pot calcular amb l'equació de Fanning, aquesta es presenta a continuació.

$$\Sigma F_{rectes} = 2 \cdot f \cdot v^2 \cdot \frac{L}{D} \quad \text{Equació 12.12.1.3}$$

on:

$\Sigma F_{rectes}$ = Pèrdua de càrrega tram recte ( $m^2/s^2$ )

L= Longitud de la canonada (m)

D=Diàmetre de al canonada (m)

v= Velocitat del fluid (m/s)

f=Factor de Fanning

El factor de Fanning es funció de del grau de turbulència del fluid i de les propietats de la canonada per el que circula. Per a el seu càlcul s'utilitza l'equació de Churchill que es presenta a continuació.

$$f = 2 \cdot \left[ \left( \frac{8}{Re} \right)^{12} + \frac{1}{(A+B)^{3/2}} \right]^{1/12} \quad \text{Equació 12.12.1.4}$$

On els factors A i B es calculen:

f= Factor de Fanning

Re= Numero de Reynolds

$$A = \left\{ -2,457 \cdot \ln \left[ \left( \frac{7}{Re} \right)^{0,9} + \frac{0,27 \cdot \epsilon}{D} \right] \right\}^{16} \quad \text{Equació 12.12.1.5}$$

$\epsilon$ =Rugositat de la canonada ( Per a acer inoxidable  $\epsilon = 0,000002 m$ , per a les canonades de Hastelloy es considera el mateix valor)

$$B = \left( \frac{37530}{Re} \right)^{16} \quad \text{Equació 12.12.1.6}$$

Degut a que no es coneix el recorregut exacte de les canonades de la planta les pèrdues de carrega per accidents no es pot calcular amb exactitud, per això, es considerarà que aquestes equivalen a un 30% de les pèrdues per trams rectes.

$$\Sigma F_{accidents} = 0,3 \cdot \Sigma F_{rectes} \quad \text{Equació 12.12.1.7}$$

### 12.12.1.2 Carrega total

La carrega total del sistema es la diferència entre la carrega a l'aspiració i la carrega a la impulsió, aquesta carrega es la que haurà de subministra la bomba per a que el fluid es desplaci des de el punt inicial al punt final.

$$h = \frac{\widehat{W}}{g} \quad \text{Equació 12.12.1.8}$$

### 12.12.1.3 Potència de la bomba

Un cop realitzat el balanç d'energia mecànica del sistema es pot calcular la potència teòrica de la bomba per a la impulsió del fluid amb l'equació següent.

$$P_{teòrica} = \widehat{W} \cdot m \quad \text{Equació 12.12.1.9}$$

on:

P= Potència de la bomba (W)

$\widehat{W}$ = Treball per unitat de massa (J/kg)

m= cabal màssic (kg/s)

Degut a que no tota la energia que es subministra a la bomba es transmet al fluid degut a les pèrdues mecàniques el consum energètic de la bomba real serà superior al teòric, en el nostre cas, com no es sap el rendiment de la bomba es considerarà per aquest un valor del 65%. La potència real doncs vindrà donada per l'equació següent.

$$P_{real} = \frac{P_{teòrica}}{\eta} \quad \text{Equació 12.12.1.10}$$

on:

P= Potència de la bomba

$\eta$ = Rendiment de la bomba

### 12.12.2 Compressors

El compressor es un equip destinat a l'augment de la pressió de fluids compressibles, a la planta s'utilitza un compressor que augmenta la pressió de la sortida gas del absorbidor de 1 a 26 atm. Per a el càlcul de la potència requerida del compressor primer cal calcular el rendiment que pot assolir per a una relació de pressions i temperatures, aquest rendiment es calcula amb l'equació següent:

$$\eta = \left[ \left( \frac{P_2}{P_1} \right)^{2/7} - 1 \right] \cdot \left( \frac{T_2}{T_1} \right)^{-1} \quad \text{Equació 12.12.2.1}$$

on:

$\eta$ = Rendiment

P= Pressió (atm)

T= Temperatura (°C)

$$\eta = \left[ \left( \frac{26}{1} \right)^{2/7} - 1 \right] \cdot \left( \frac{272,5}{93} \right)^{-1} = 0,52 \quad \text{Equació 12.12.2.2}$$

Un cop calculat el rendiment es pot calcular la energia necessària del compressor amb la equació que es presenta a continuació.

$$\widehat{W} = \frac{\gamma}{(\gamma-1) \cdot \eta} \cdot \frac{z \cdot R \cdot T}{PM} \cdot \left[ \left( \frac{P_2}{P_1} \right)^{1-\frac{1}{\gamma}} - 1 \right] \quad \text{Equació 12.12.2.3}$$

on:

$\widehat{W}$ = Treball per unitat de massa (KJ/kg)

$\gamma$ = Quocient de capacitats calorífiques Cp/Cv

T= Temperatura inicial del gas (°C)

PM= Pes molecular del gas (Kg/Kmol)

P= Pressió (atm)

z= Factor de compressibilitat del gas (1)

R= Constant dels gasos ideals (8,314 KJ/Kmol·°C)

$$\widehat{W} = \frac{1,129}{(1,129-1) \cdot 0,52} \cdot \frac{z \cdot 8,314 \cdot 93}{67,37} \cdot \left[ \left( \frac{26}{1} \right)^{1-\frac{1}{1,129}} - 1 \right] = 87,31 \text{ KJ/kg} \quad \text{Equació 12.12.2.4}$$

La potència teòrica del compressor es calcula com es presenta a continuació:

$$P_{teòrica} = \widehat{W} \cdot m \quad \text{Equació 12.12.2.5}$$

on:

m= cabal màssic del gas (kg/s)

$$P = 87,31 \cdot 0.349 = 30,43 \text{ KW}$$

### 12.12.3 Bufadors i Ventiladors

Els bufadors i ventiladors tenen la funció de proporcionar a un fluid gas la energia necessària per a vèncer la pèrdua de carrega del sistema des de el punt de succió al punt de descarrega. La treball per unitat de massa necessària per a un bufador es calcula amb l'equació següent:

$$\widehat{W} = \frac{R \cdot T}{PM} \cdot \ln \left( \frac{P_D}{P_A} \right) \quad \text{Equació 12.12.3.1}$$

on:

$\widehat{W}$ = Treball epr unitat de massa (KJ/kg)

R= Constant dels gasos ideals (8,314 KJ/Kmol·°C)

T= Temperatura inicial del gas (°C)

PM= Pes molecular del gas (Kg/Kmol)

$P_D$  Pressió de descarrega (atm)

$P_A$ = Pressió d'aspiració (atm)

La potència del bufador vindrà donada per l'equació següent:

$$P_{teòrica} = \widehat{W} \cdot m \quad \text{Equació 12.12.3.2}$$

on:

m= cabal màssic del gas (kg/s)

### 12.12.4 Impulsió de sòlids

Degut a que es manipulen materials sòlids a la planta es precisa de sistemes capaços de transportar-los.

Per una banda s'ha escollit el sistemes de cargol sense fi, aquets son sistemes que consten d'un recipient on es diposita el material a transportar i a la part inferior es troba el cargol sense fi que gira alimentat amb un motor electric dins d'un tub rígid per on es desplaçarà el material fins l'altre extrem. Aquets sistema s'utilitzaran per a

distàncies curtes com poden ser el carregament de les sitges o el transport del Carbaryl de la centrifuga al assecador. La empresa on s'adquireixen aquets equips es HAPMAN, a continuació es presenta la figura amb el sistema de transport comentat.



**Figura 12.12.4.1** sistema de cargol sense fi per a transport de sòlids

Per altre banda, per a distàncies més llargues els sistemes de cargol sense fi no son els més adients, per això, es disposa de sistemes transport tubular per arrossegament, aquest sistema consta d'una canonada per el interior de la qual circula una cadena amb anelles que arrosseguen el material per el seu interior fins al punt de descarrega. Aquets equips s'adquireixen també a la empresa HAPMAN, a la figura següent es mostra el sistema de transport per arrossegament escollit.



*Figura 12.12.4.2 Sistema tubular de transport per arrossegament.*

## 12.13 EQUIPS DE NEUTRALITZACIÓ DE MIC

### 12.13.1 Introducció

Com s'ha esmentat la producció del Carbaryl a la nostre planta comporta la producció de MIC en un pas intermedi, al ser un compost extremadament tòxic cal disposar de un sistema de tractament de la emissió en cas d'emergència per evitar el seu alliberament a la atmosfera.

EL MIC es un component inflamable i molt reactiu amb aigua i bases, el sistema de control de la emissió de MIC aprofita aquestes dues propietats per a la eliminació d'una manera ràpida i total. El sistema consta de un absorbidor amb una solució aquosa de sosa seguit d'una torre de cremat, ambdós equips han de ser dissenyats per a tractar el cabal màxim de venteig per assegurar que encara que un dels dos falles el equip que roman en operació asseguraria la eliminació total del MIC.

### 12.13.2 Columna d'absorció AB-801

#### 12.13.2.1 Disseny funcional

La finalitat de la columna d'absorció AB-801 és la de neutralitzar el MIC contingut en els tancs d'emmagatzematge fent-lo reaccionar amb aigua en cas d'emergència.

Per aquest fi es dissenya una columna d'absorció empacada considerant que per aquest ha de circular el cabal de venteig de MIC (2151 m<sup>3</sup>/h) i en contracorrent circula una solució de hidròxid de sodi al 10%, aquesta s'emmagatzema en un tanc de mescla TM-801 dissenyat per a aquest fi. En l'absorbidor es dona la reacció amb l'aigua formant diòxid de carboni i dimetil urea.

Per assegurar que reacciona tot el MIC s'utilitzarà un cabal de solució bàsica un 25% superior al mínim, així doncs, el cabal utilitzat és de 2,28m<sup>3</sup>/h.

Les dimensions del absorbidor vindran donades per el temps de residència que es necessita, aquest es fixa en 10 segons considerant que és superior al temps de reacció del MIC amb la solució de hidròxid de sodi.

Suposant un diàmetre de columna de 1 m de diàmetre es calculà la velocitat del gas dins de la columna.

$$v_{gas} = \frac{Q_{gas}}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}} \quad \text{Equació 12.13.2.1}$$

on:

v= velocitat (m/s)

Q= cabal volumètric (m<sup>3</sup>/s)

D= diàmetre de la columna (m)

$$v_{gas} = \frac{0,59}{\frac{\pi}{4} \cdot 1^2} = 0,76 \text{ m/s}$$

Tot i que no es tenen dades de la velocitat d'inundació que podria tindre la columna, es considera que la velocitat que s'obté amb una columna de 1 metre de diàmetre no donarà problemes d'inundació.

Per calcular el volum d'espai buit dins de la columna es calculà a continuació:

$$V_{buit} = \tau \cdot Q \quad \text{Equació 12.13.2.2}$$

on:

V= volum (m<sup>3</sup>)

$\tau$ = temps de residència (s)

Q= cabal volumètric de MIC (m<sup>3</sup>/s).

$$V_{buit} = 10 \cdot 0,59 = 5,9 \text{ m}^3$$

El volum de la columna considerant que el rebliment ocuparà un 20% de l'espai buit serà:

$$V_{buit} = 5,9 \cdot 1,2 = 7,17 \text{ m}^3$$

Donat aquest volum la alçada del rebliment total es calcula:

$$h = \frac{V}{\frac{\pi \cdot D^2}{4}} \quad \text{Equació 12.13.2.3}$$

on:

H= altura columna (m)

V= volum columna (m<sup>3</sup>)

D= diàmetre columna (m)

$$h = \frac{7,17}{\frac{\pi}{4} \cdot 1^2} = 9,12 \text{ m}$$

Es rebliment escollit per a la columna es Pall Rings i s'escull la seva mida segons la taula

#### 12.13.2.1

**Taula 12.13.2.1** Mides de rebliment segons diàmetres de columna

Mida del rebliment (polzades)	Diàmetre de la columna (m)
1/2" - 5/8"	0,1524 - 0,3048
5/8" - 1"	0,3048 - 0,4572
1" - 1 1/2"	0,4572 - 0,6096
1 1/2" - 2"	0,6096 - 1,2192
2" - 3"	>1,2192

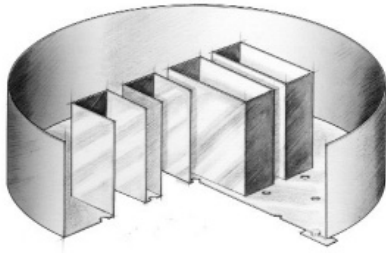
Donat el diàmetre de la columna s'utilitzarà Pall rings de 2 polsades distribuït de manera aleatòria.

#### 12.13.2.2 Disseny mecànic

A continuació es detallen els diferents elements que contindrà la columna al seu interior, per fer-ho s'utilitza la guia donada per la casa "Saint-Gobain Norpro":

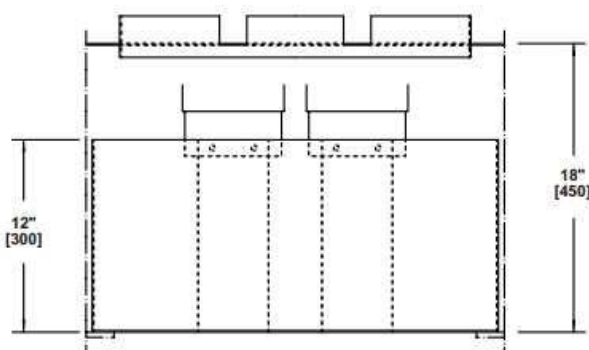
- **Distribuïdor de líquid** a la part superior: aquest permet distribuir el líquid d'entrada de la columna i que quedi distribuït de manera homogènia. S'escull un distribuïdor de tipus graella, presentat a la figura 12.13.2.1.





**Figura 12.13.2.1** Distribuidor de líquid de graella utilitzat a la columna AB-801

L'alçada del distribuïdor es de 450 mm, tal com es presenta a la figura 12.13.2.2 extreta de la guia del distribuïdor.



**Figura 12.13.2.3** Esquema del distribuïdor de líquid de graella utilitzar en la columna AB-801.

- **Redistribuïdor de líquid** a la part intermèdia: aquest permet distribuir el líquid de manera homogènia a la part inferior. S'utilitza el mateix redistribuidor que el distribuïdor superior, ja que segons la casa "Saint-Gobain Norpro" es pot fer servir també per a la redistribució del líquid sota el rebliment superior.
- **Reixetes de suport:** per poder suportar l'empaquetament de les dues zones. El tipus de reixeta de suport és funció de diferents factors crítics de disseny. En primer lloc, la placa ha de poder aguantar físicament el rebliment, i en segon lloc el percentatge d'àrea lliure ha de permetre la circulació sense restricció pel líquid i pel gas. Per últim, ha de ser fàcil d'instal·lar. Hi ha diferents criteris per la selecció de la placa de suport:
  - Tipus de rebliment: aleatori o estructurat
  - Característiques del procés (corrosió, temperatura...)

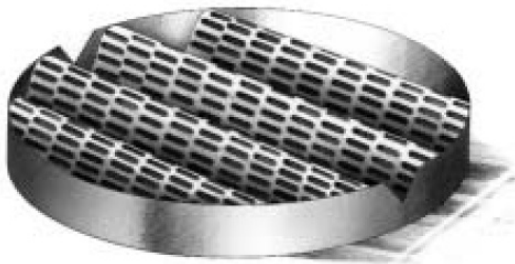
- Carrega màxima de disseny

La taula 12.13.2.2 permet escollir el tipus de suport segons les característiques de la columna, tal com indica la casa “Saint-Gobain Norpro”.

**Taula 12.13.2.2.** Selecció del suport segons les característiques de la columna.

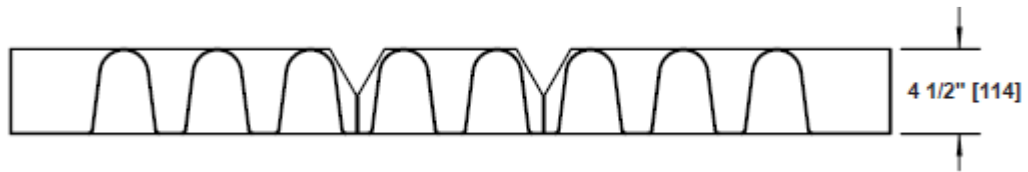
SELECTING A SUPPORT PLATE			
Model Number	Tower ID in. [mm]	Type Packing Supported	Construction Material
818	< 48 [1200]	Any Random	Metals and Thermoplastics
809	< 35.25 [890]	Random (light)	Metals
804	> 36 [900]	Any Random	Metals and Thermoplastics
819	< 48 [1200]	Random (except ceramic)	FRP
1019	> 48 [1200]	Random (except ceramic)	FRP
134	Any	Structured	Metal
Contact your local Saint-Gobain NorPro representative for applications outside the “standards” shown in this brochure.			

Segons les característiques de la columna AB-801, s’escull el suport 819, ja que permet treballar amb rebliment metàl·lic desordenat i amb una columna de diàmetre inferior a 1200 mm.



**Figura 12.13.2.4.** Suport 818 utilitzat en la columna AB-801.

S'utilitzen dos suports, un pel rebliment inferior i un altre pel superior. L'alçada de cada suport és 114 mm, tal com indica la figura 12.4.2.5 extreta de la guia del proveïdor.



**Figura 12.13.2.5** Esquema del suport utilitzat en la columna AB-801.

- **Boques d'home:** aquestes serveixen per poder introduir les sondes i per poder accedir en cas de fer algun tipus de manteniment. El diàmetre d'aquestes és de 500 mm de diàmetre.

Hi hauran cinc boques d'home, distribuïdes de la següent manera:

- A la part superior, sobre el distribuïdor de líquid.
- A la part superior, entre el distribuïdor i el rebliment.
- A la part central, entre les dues zones de rebliment.
- A la part central, entre el distribuïdor i el rebliment.
- A la part inferior, entre l'aliment vapor recirculat i el suport del rebliment inferior

Cal tenir en compte l'espai necessari que s'ha de deixar en la part inferior de la columna, entre les dues zones de rebliment i en la part superior; a més, cal deixar un espai entre els distribuïdors i els rebliments. Aquests espais depenen de la zona de treball, tal com s'indica a continuació:

- 1 metre entre el distribuïdor superior i el capçal superior.
- 0,75 metres per sota del distribuïdor superior.
- 1 metre entre les dues zones de rebliment.
- 0,75 metres per sota del distribuïdor inferior.
- 2 metres entre el suport de rebliment inferior i el capçal inferior.

Per tant, es pot calcular l'alçada total del cos de la columna, tal com s'indica a continuació:

$$\begin{aligned}
 h_{cos} &= h_{espai superior} + h_{distribuidor} + h_{espai dist-rebl} + \\
 &h_{rebliment superior} + h_{suport} + h_{espai intermedi} + h_{redistribuidor} \\
 &+ h_{espai dist-rebl} + h_{rebliment inferior} + h_{suport} + h_{espai inferior} = \\
 &= 1000 \text{ mm} + 450 \text{ mm} + 750 \text{ mm} + 4560 \text{ mm} + 114 \text{ mm} + 1000 \text{ mm} + \\
 &+ 450 \text{ mm} + 750 \text{ mm} + 4560 \text{ mm} + 114 \text{ mm} + 2000 \text{ mm} = \mathbf{15784 \text{ mm}}
 \end{aligned}$$

A continuació es dissenya la columna d'absorció AB-801 mitjançant el codi ASME, es realitza el càlcul per a la carcassa cilíndrica i per als fons toriesfèrics.

### Pressió de disseny

La pressió de disseny per a la es calcula aplicant la norma següent:

$$Pressió \text{ de disseny} = \max(1,1 \cdot P. \text{operació}, P. \text{operació} + 2atm)$$

$$Pressió \text{ de disseny} = \max(1,1atm, 3atm) = 3atm$$

Per tant, sabent que la pressió d'operació és 1 atmosfera es pot calcular la pressió de disseny.

Pressió operació = 1 atm.

Pressió de disseny = **3 atm.**

### Temperatura de disseny

La temperatura de disseny es calcula amb l'equació següent:

$$Temperatura \text{ de disseny} = \max(80^{\circ}C, T. \text{operació}, +15^{\circ}C)$$

Com que la torre treballa a temperatura ambiental, la temperatura de disseny serà de **80 °C**

### Material

Per decidir quin és el millor material per a la columna s'han de considerar les substàncies principals presents a la columna. Per una banda el MIC segons el llibre "The Use and Storage of Methyl Isocyanate (MIC) at Bayer CropScience", el material més adient per fer-ho es acer o vidre degut a la fragilitat d'aquest últim es decideix treballar amb acer inoxidable 316L, aquest, es molt resistent en termes de corrosió i als canvis bruscos de temperatura. Per altre banda tenim el hidròxid de sodi al 10%,

amb la taula 12.13.2.3 podem veure com el acer inoxidable es un material resistent a la corrosió d'aquesta substancia i com en el cas del MIC es pot utilitzar acer inoxidable 316L.

Analitzades les dues substancies principals es considera que el millor material per a la columna i el rebliment es el acer inoxidable 316L

Taula 12.13.2.3 Resistència del material per varies substancies.

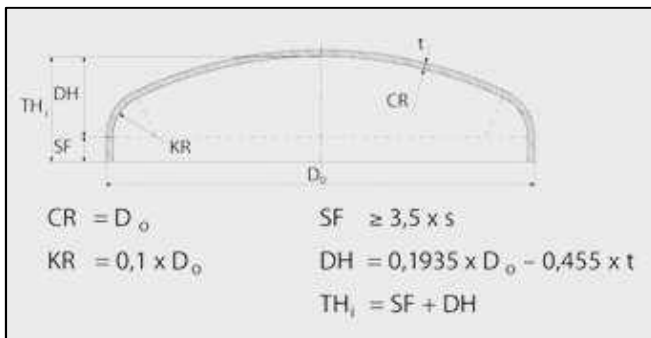
### CHEMICAL RESISTANCE GUIDE

CHEMICAL	FORMULAS	PLASTIC										ELASTOMER					SEAL		METAL							
		APPROX. SP.GRAVITY @ 100% CONC. % CONCENTRATION	PVC	CPVC	POLYETHYLENE CROSS LINKED (XLPE)	DURAPLUS ABS	RYTON	HALAR	PEEK	TEFLON	EPDXY	VINYLESTER	POLYSULFONE	VITON	EPDM	NEOPRENE	BUNA N (NITRILE)	304 STAINLESS STEEL	316 STAINLESS STEEL	CERAMIC	TITANIUM	HASTELLOY C				
Calcium Nitrate	Ca(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	- 1.82	140	180	180	250	140	140	140	200	250	-	400	250	200	-	210	180	100	180	-	-	A	-	-	-
Calcium Oxide	CaO	-	-	140	180	180	250	140	-	150	-	250	-	400	-	-	-	210	160	180	-	-	A	-	-	-
Calcium Phosphate	CaH <sub>2</sub> (PO <sub>4</sub> ) <sub>2</sub>	- 2.3	-	-	-	-	-	140	140	-	-	-	-	-	150	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Calcium Sulfate	CaSO <sub>4</sub>	- 2.9	140	180	180	210	140	140	150	200	250	-	400	250	200	-	200	210	160	180	A	A	A	A	A	B
Calcium Sulfide	CaS	-	140	140	180	180	140	140	-	-	-	-	400	200	200	-	200	150	100	150	-	-	-	-	-	-
Calcium Thiosulfate	CaS <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	- 1.87	-	-	-	-	140	140	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Calgon (Sodium Hexametaphosphate)	-	-	-	-	-	-	-	140	140	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	A	A	-	-
Cane Sugar Liquors	-	-	-	140	180	140	250	140	-	150	-	150	-	350	-	-	200	250	150	150	A	A	A	A	A	-
Caprylic Acid (Octanoic Acid)	CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) <sub>6</sub> COOH	-	140	180	150	220	-	-	X	-	150	-	350	X	200	-	-	-	-	-	-	-	A	A	-	-
Carbinol (see Alcohol, Methyl)	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Carbolic Acid (see Phenol)	-	- 1.07	-	-	-	120	70	70	X	-	-	-	100	-	-	200	73	X	X	-	-	-	A	A	B	A
Carbon Bisulfide (see Carbon Disulfide)	CS <sub>2</sub>	-	-	X	X	X	68	X	X	X	200	73	-	400	73	X	-	180	X	X	X	A	A	A	A	A
Carbon Dioxide (wet or dry)	CO <sub>2</sub>	-	140	180	180	250	140	140	80	-	250	-	350	200	200	-	210	170	150	180	-	-	A	A	A	A
Carbon Disulfide	CS <sub>2</sub>	-	-	X	X	X	68	X	X	X	200	73	-	400	73	X	-	180	X	X	X	A	B	A	A	-
Carbon Monoxide	CO	-	140	180	180	250	140	140	140	-	150	-	400	200	200	-	180	-	200	180	A	A	A	A	-	
Carbon Tetrachloride	CCl <sub>4</sub>	- 1.6	X	X	X	140	X	X	X	-	250	-	350	150	-	-	180	X	X	X	A	A	A	A	C	A
Carbonic Acid	H <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	-	140	210	210	250	140	140	-	-	250	-	350	180	140	-	200	210	70	180	A	A	A	A	-	
Casein	-	-	-	-	-	60	-	-	-	-	-	-	250	-	-	180	180	-	-	-	-	-	-	-	-	
Castor Oil	-	- 0.95	140	*	150	250	140	140	140	-	250	-	350	220	200	-	140	140	100	140	-	-	A	A	-	
Catsup	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	A	A	-	
Caustic Lime -Calcium Hydroxide	Ca(OH) <sub>2</sub>	-	140	180	200	250	-	-	178	-	250	-	250	100	180	-	210	210	70	140	A	A	A	-	-	
Caustic Potash (Potassium Hydroxide)	KOH	-	-	-	-	-	-	-	178	-	250	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
Caustic Soda (Sodium Hydroxide)	NaOH	- 2.04	140	180	200	140	-	-	-	-	-	-	200	180	150	-	X	200	150	70	-	-	A	-	-	
Caustic Soda (Sodium Hydroxide)	NaOH	- 2.13	140	180	200	100	X	140	-	-	-	-	250	120	100	-	X	200	140	180	-	-	A	-	-	

**Esponsor dels fondo i el capçal. Càlcul a pressió interna**

Els tipus de fons i capçals més utilitzats són el toriesfèric, l'hemisfèric i l'el·lipsoïdal, la seva elecció depèn de les condicions d'operació i el cost econòmic, en aquest cas s'utilitza el toriesfèric.

Aquest fons ve definit pel radi de la corona (L) i el radi del colze (r) que es calculen respecte al diàmetre del cos donat pel Hysys, tal com indica la casa "Koenig-co" en la figura 12.13.2.6, extreta de la seva pàgina web.



**Figura 12.13.2.6** Esquema del fons toriesfèric per tal de determinar l'alçada del fons de la columna d'absorció AB-801.  $s=t$ .

Per tant,

$$L = D = 1000 \text{ mm}$$

$$r = 0,1 \cdot D = 0,1 \cdot 1000 \text{ mm} = 100 \text{ mm}$$

$$\frac{L}{r} = 10$$

Per una relació  $L/r$  menor de  $16 \frac{2}{3}$  l'espessor es calcula amb l'equació 12.13.2.4.

$$t = \frac{P \cdot L \cdot M}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2 \quad \text{Equació 12.13.2.4}$$

on:

t = espessor del fondo (mm)

P = pressió de disseny del recipient (bar) = 3

M = factor que depèn de la relació  $L/r$ , en aquest cas igual a 1,54

E = factor de soldadura = 0,85 (radiografiat doble parcial)

S = càrrega admissible del material (bar) = 1082,46bar

L = radi de la corona (mm) = 1000

El sobre espessor per corrosió del material va de 0,3 a 0,5 mm/any en aquest cas s'agafa el factor més restrictiu de 0,5 mm/any, suposant que la vida útil del tanc seran 15 anys, el sobreesspessor serà 7,5 mm.

$C_1 = \text{marge per corrosió (mm)} = 7,5 \text{ mm}$

$C_2 = \text{tolerància de fabricació (mm)} = 10\% \text{ de l'espessor}$

El resultat és de 10,26 mm, però donat que els espessors estàndards de xapa a Europa són: 3, 4, 5, 6, 8, 10, 12, 15, 20..., s'agafa un espessor dels fondos de 12 mm.

***espessor del fondo i el capçal = 12mm***

### **Espessor del cos de la columna. Càlcul a pressió interna**

L'equació 12.13.2.5 permet trobar l'espessor del cos de la columna.

$$t_1 = \frac{P \cdot R_{int}}{S \cdot E - 0,6 \cdot P} + C \cdot A \quad \text{Equació 12.13.2.5}$$

on:

$t_1 = \text{espessor del cos (mm)}$

$P = \text{pressió de disseny del recipient (bar)} = 3$

$R_{int} = \text{radi intern de la columna (mm)} = 500$

$E = \text{factor de soldadura} = 0,85 \text{ (radiografiat doble parcial)}$

$S = \text{càrrega admissible del material (bar)} = 1082,46 \text{ bar}$

$C \cdot A = \text{sobreesspessor (mm)}$

La tolerància de fabricació pel cas d'un cilindre és nul·la i el sobreesspessor per corrosió del material és de 0,5 mm/any, suposant que la vida útil del tanc seran 15 anys el sobreesspessor serà 7,5 mm.

El resultat és de 9,13 mm, però donat que els espessors estàndards de xapa a Europa són: 3, 4, 5, 6, 8, 10, 12, 15, 20..., s'agafa un espessor del cos de 10 mm.

***espessor dels cos de la columna = 10 mm***

**Alçada dels fondo i el capçal**

Una vegada determinats els espessors del cos i els fondo i capçal es pot determinar l'alçada del fondo i el capçal per determinar l'alçada total de l'equip, tal com indica la casa "Koenig-co" en la figura , extreta de la seva pàgina web. Per tant, es troben les equacions 12.13.2.6, 12.13.2.7 i 12.13.2.8 per tal de determinar l'alçada total de la columna.

$$DH = 0,1935 \cdot D_o - 0,455 \cdot t \quad \text{Equació 12.13.2.6}$$

$$SF = 3,5 \cdot s \quad \text{Equació 12.13.2.7}$$

$$TH = SF + DH \quad \text{Equació 12.13.2.8}$$

Es calcula l'alçada del fons toriesfèric sense tenir en compte l'espessor de la xapa, tal com s'indica a continuació:

$$DH = 0,1935 \cdot 1000 \text{ mm} - 0,455 \cdot 12 \text{ mm} = 188 \text{ mm}$$

$$SF = 3,5 \cdot 12 \text{ mm} = 35 \text{ mm}$$

$$TH = 42 \text{ mm} + 188 \text{ mm} = 230 \text{ mm}$$

Per tant, l'alçada de la columna sense l'espessor és de **16014 mm**.

**12.13.2.2.1 Pes de la columna****Pes de la columna buida**

Es calcula el volum del fondo i el capçal de la columna mitjançant l'equació 12.13.2.9.

$$Vi = 0,1 \cdot (D_{col})^3 \quad \text{Equació 12.13.2.9}$$

Per tant,

$$Vi = 0,1 \cdot (1000 \text{ mm})^3 = 0,1 \text{ m}^3$$

Com que es tenen un fondo i un capçal el volum és de  $0,2 \text{ m}^3$ .

Per calcular el pes dels capçals, es calcula el volum extern del fondo i el capçal, mitjançant l'equació 12.13.2.10.

$$Ve = 0,1 \cdot ((D_{col} + 2 \cdot t)^3) \quad \text{Equació 12.13.2.10}$$

Per tant,

$$Ve = 0,1 \cdot (1000 \text{ mm} + 2 \cdot 12 \text{ mm})^3 = 0,107 \text{ m}^3$$

Com que es tenen dos capçals el volum és de  $0,214 \text{ m}^3$ .



Per tant, la resta correspon al volum de la paret dels capçals:

$$V_{paret} = 0,214 \text{ m}^3 - 0,1 \text{ m}^3 = 0,114 \text{ m}^3$$

Es calcula el volum intern i extern del cos de la columna, per tal de determinar el volum de paret.

$$V_i = \pi \cdot \left(\frac{D_{col}}{2}\right)^2 \cdot h = \pi \cdot \left(\frac{1000 \text{ mm}}{2}\right)^2 \cdot 15784 \text{ mm} = 12,39 \text{ m}^3$$

$$V_e = \pi \cdot \left(\frac{D_{col} + 2 \cdot t}{2}\right)^2 \cdot h = \pi \cdot \left(\frac{1000 \text{ mm} + 2 \cdot 10 \text{ mm}}{2}\right)^2 \cdot 15784 \text{ mm}$$

$$= 12,90 \text{ m}^3$$

$$V_{paret} = 12,90 \text{ m}^3 - 12,39 \text{ m}^3 = 0,50 \text{ m}^3$$

Per tant, el volum total de la paret de la columna és de  $0,50 \text{ m}^3$ .

Sabent que la densitat del acer inoxidable AISI 316L és de  $7950 \text{ Kg/m}^3$ , es pot calcular el pes de la columna buida, i aquest s'ha de sobredimensionar un 10 % degut al pes de les soldadures connexions de les canonades, boques d'home, etc.

$$Pes_{buit} = 1,1 \cdot (0,5 \text{ m}^3 \cdot \frac{7950 \text{ Kg}}{1 \text{ m}^3}) = 4372,1 \text{ Kg}$$

#### Pes de la columna plena d'aigua

Es calcula el volum de la columna sumant el volums dels capçals i el cos:

$$V_{col} = 0,2 \text{ m}^3 + 12,39 \text{ m}^3 = 12,59 \text{ m}^3$$

Per tant, amb la densitat de l'aigua i el pes de la columna buida es pot calcular el pes de la columna amb aigua:

$$Pes_{col \text{ aigua}} = 4372,1 \text{ Kg} + 12,59 \text{ m}^3 \cdot \frac{1000 \text{ Kg}}{1 \text{ m}^3} = 16962,1 \text{ Kg}$$

### 12.13.3 Torre de cremat

Les torres de cremat són un equip utilitzat per el tractament de compostos gasosos mitjançant una combustió que dona lloc a productes més oxidats i menys nocius per al medi ambient o per a les persones.

Les torxes són generalment categoritzades de dues maneres: per l'altura de la punta de la torxa; a nivell de terra o elevades i pel mètode de millorament de mescla de combustió de la torxa; auxiliat amb vapor, auxiliat amb aire, auxiliat amb pressió o no auxiliat. Elevant la flama es poden prevenir condicions potencialment perilloses a nivell del sòl.

A més, els productes de la combustió poden dispersar-se per sobre de les àrees de treball per reduir els efectes del soroll, calor, fum, olors desagradables i efectes nocius del propi gas.

Tal com en tots els processos de combustió, es requereix un adequat subministrament d'aire i un bona barreja per una combustió completa. Els diversos dissenys de torxa difereixen principalment en el seu grau de barreja.

#### Torxes auxiliades amb vapor

Les torxes auxiliades amb vapor són elevades per raons de seguretat, que cremen el gas ventejat essencialment en una flama de difusió. Aquestes són la majoria de les torxes instal·lades i són el tipus de torxes predominants en les refineries i a les plantes de processos químics. [(12.13) 1,2]

Per assegurar un adequat subministrament d'aire i bona barreja, aquest tipus de sistemes de torxes injecta vapor a la zona de combustió per promoure la turbulència i induir aire a la flama.

#### Torxes auxiliades amb aire

Algunes torxes utilitzen aire forçat per subministrar aire per a donar lloc a una combustió completa. L'aire de combustió és proporcionat per un ventilador al fons del cilindre. La quantitat d'aire de combustió pot ser modificada, variant la velocitat del ventilador. L'avantatge principal de les torxes auxiliades amb aire, és que poden ser utilitzades on no estigui disponible vapor.

#### Torxes no auxiliades

La torxa no auxiliada és només un cremador sense altra provisió auxiliar per millorar el procés de barreja de l'aire a la flama. El seu ús es limita essencialment per corrents de

gas que tenen un baix contingut de calor i una baixa relació carbó/hidrogen que es crema fàcilment sense produir fum. [(12.13) 5]

### Torxes auxiliades amb pressió

Les torxes auxiliades amb pressió utilitzen la pressió del corrent ventejat per promoure el barrejat en el cremador. Les torxes auxiliades amb pressió, generalment (però no necessàriament), tenen la instal·lació del cremador a nivell del sòl, i consegüentment, han de ser localitzades en una àrea remota de la planta on hi hagi suficient espai disponible.

#### **12.13.3.1 Factors que Afecten l'Eficiència**

Els principals factors que afecten l'eficiència de la combustió per torxa són la inflamabilitat dels gasos ventejats, la temperatura d'autoignició, el poder calorífic (Btu/ft<sup>3</sup>), la densitat i el barrejat a la zona de la flama.

Els límits d'inflamabilitat dels gasos cremats afecten l'estabilitat de la ignició i l'extinció de la flama. Els límits d'inflamabilitat estan definits com els límits de composició estequiomètrica (màxim i mínim) d'una barreja de combustible-oxigen que es cremarà indefinidament condicions donades de temperatura i pressió sense una font d'ignició addicional. En altres paraules, els gasos han d'estar dins dels seus límits d'inflamabilitat per cremar. Quan els límits d'inflamabilitat són estrets, l'interior de la flama pot tenir insuficient aire perquè la barreja es cremi.

Per a la majoria dels corrents ventejats, el poder calorífic també afecta l'estabilitat de la flama, i l'estructura de la flama. Un valor baix de poder calorífic produeix una flama més freda que no afavoreix la cinètica de la combustió i que també s'extingeix més fàcilment.

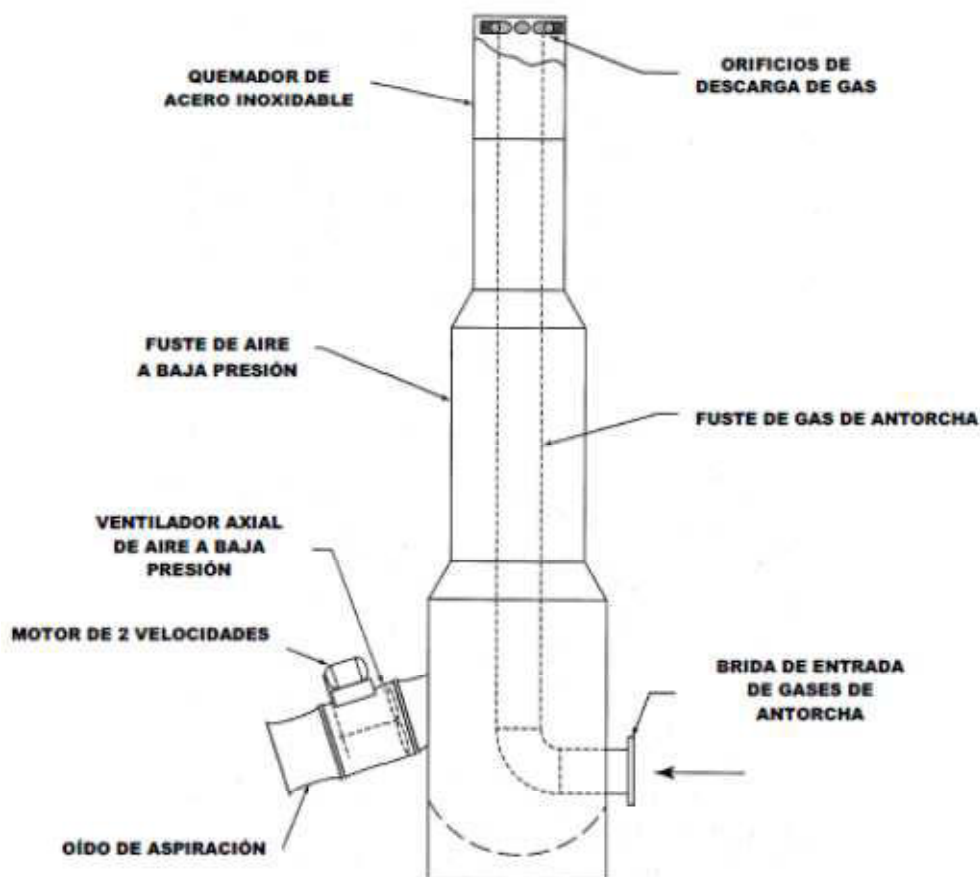
#### **12.13.3.2 Descripció del procés**

En el nostre cas s'ha decidit la instal·lació d'una torxa elevada auxiliada amb aire, els elements d'aquesta generalment són: canonada de recol·lecció del gas ventejat, ventilador, serveis (combustible i aire), canonada des de la base cap amunt, cilindre

separador, segell de líquid, xemeneia de la torxa, segell de gas, cremador i cremadors pilots.

### 12.13.3.2.1 Canonada de Transport de Gas

Els corrents de ventilació del procés són enviades des del punt d'emissió de la instal·lació fins a la localitat de la torxa a través del capçal recol·lector de gas. La canonada (normalment d'acer al carbó) es dissenya per minimitzar la caiguda de pressió. Els conductes no són molt utilitzats per ser més propensos a fuites d'aire. El muntatge de la canonada es dissenya per evitar qualsevol ramal mort i les trampes de líquid. La canonada està equipada per les purgues, de manera que no es produeixin barreges explosives en el sistema de la torxa durant el encès o durant l'operació.



*Figura 12.13.3.1 Diagrama d'una torxa auxiliada amb aire*

### 12.13.3.2.2 Cilindre Separador

Els líquids que puguin estar en el corrent del gas ventejat o que es puguin condensar en el capçal recol·lector i en les línies de transferència, són remogudes per un cilindre separador. El tambor separador, típicament és un recipient horitzontal o vertical localitzat a la base de la torxa o prop d'ella, o un recipient vertical localitzat dins de la base de la xemeneia de la torxa.

El líquid en el corrent ventejat pot extingir la flama o provocar una combustió irregular i fum. A més, el cremar líquids en torxa pot generar una rosada de substàncies químiques que pot arribar a nivell del sòl i crear una risc de seguretat.

### 12.13.3.2.3 Segell de Líquid

Els corrents ventejats del procés són generalment passades a través d'un segell de líquid abans d'anar a la xemeneia de la torxa. El segell de líquid pot estar incorporat en el cilindre separador. Aquest evita possibles retorns de flama quan la flama es succionada cap a dins de la xemeneia. El segell de líquid també serveix per mantenir una pressió positiva en el corrent cap amunt en el sistema i actua com una mampara mecànica amb qualsevol ona de xoc explosiva a la xemeneia.

### 12.13.3.2.4 Xemeneia de la Torxa

Per raons de seguretat, s'utilitza una xemeneia per elevar la torxa. la torxa ha d'estar localitzada de manera que no presenti riscos per a les instal·lacions circumdants ni al personal. Les torxes elevades poden ser auto-sostingudes, sostingudes per retingudes o sostingudes estructuralment per una torre. Les torxes auto-sostingudes són generalment utilitzades per a torres de torxa de baixa alçada d'entre 30 i 100 ft (9 i 30m), però poden ser dissenyades fins per a 250 ft (75m). Les sostingudes per retingudes són dissenyades per a altures majors a 300 ft (90 m), mentre que les sostingudes per torre són dissenyades per a alçades superiors a 200 ft ( 60 m) .[(12.13) 4, 6, 7, 8,9, 10]

#### 12.13.3.2.5 Segell de Gas

L'aire pot tendir a tornar- cap a dins de la xemeneia a causa del vent o la contracció tèrmica dels gasos de xemeneia, creant el potencial d'una explosió. Per prevenir això, típicament s'instal·la un segell de gas a la xemeneia per impedir que el flux de l'aire torni cap a la xarxa de gasos de la torxa.

#### 12.13.3.2.6 Cremador

El cremador està dissenyada per proporcionar una combustió del gas ventejat ambientalment acceptable en tot el rang de capacitat del sistema de la torxa. Es prenen en consideració l'estabilitat de la flama, la fiabilitat de l'encesa i la supressió del soroll. La capacitat mínima i màxima d'una torxa per cremar un gas amb una flama estable, és una funció del disseny del cremador. Els cremadors amb dissenys moderns de retenció de flama, poden tenir una flama estable en tot un rang de velocitat de sortida de gas de la torxa d'1 a 600 ft/seg (180 m/s).[(12.13) 2]

#### 12.13.3.2.7 Cremadors Pilots

Les regulacions de la Agència de Protecció Mediambiental (EPA) requereixen la presència d'una flama contínua. S'obté un encès fiable per cremadors pilots continus dissenyats per a l'estabilitat i localitzats al voltant del perímetre exterior del cremador de la torxa. Els cremadors pilots són encesos per una sistema de font d'encesa, el qual pot ser dissenyat per activació manual o automàtica. Els sistemes automàtics són generalment activats per un dispositiu de detecció de flama utilitzant un termoparell o un sensor infraroig.

#### 12.13.3.2.8 Ventilador

Una flama de difusió rep el seu oxigen de combustió per difusió d'aire de l'atmosfera circumdant cap a dins de la flama. L'alt volum del flux de combustible en una torxa pot requerir més aire de combustió a una velocitat més ràpida que la que una simple difusió de gas proporcioneu. El ventilador axial situat a la part inferior de la torxa

augmenten la turbulència del gas a la zona límit de la flama, proporcionant més aire de combustió i millorant l'eficiència de combustió.

### 12.13.3.3 Disseny funcional

Es dissenya una torre de cremat amb la finalitat de tractar el cabal màxim de venteig de MIC que es pogués donar en cas d'emergència (2151 m<sup>3</sup>/h). El corrent que surt de la columna d'absorció es vehicularia fins la torxa per eliminar el possible MIC que hi pogués quedar i posteriorment s'emetria a l'atmosfera.

Es dissenya la torre de cremat per a complir la normativa de la agència de protecció ambiental dels EE.UU, (EPA 452/B-2-002 secció 3.2).

#### 12.13.3.3.1 Requeriments de combustible auxiliar

A algunes torxes se'ls proporciona combustible auxiliar per cremar algun corrent de gas amb baixes concentracions o bé quan el corrent està per sota del rang d'inflamabilitat o del poder calorífic necessari per mantenir una flama estable. la quantitat de combustible requerida es calcula per mantenir el poder calorífic net del corrent de gas ventejat a un mínim de 300 Btu/ft<sup>3</sup> (2668,56 Kcal/m<sup>3</sup>).

A continuació es calcula el poder calorífic inferior del MIC per a saber si caldrà o no la adició d'un combustible auxiliar al corrent de venteig.

$$PCI = 8140 \cdot C + 29000 \cdot \left( H - \frac{O}{8} \right) + 2220 \cdot S \quad \text{Equació 12.13.3.1}$$

on:

PCI = Poder calorífic inferior (Kcal/kg)

C = Percentatge en pes de Carboni

H = Percentatge en pes de Hidrogen

$\frac{O}{8}$  = Percentatge en pes de Hidrògens combinats amb oxigen de la mateixa molècula

S = Percentatge en pes de Sofre

MIC

$$PCI = 8140 \cdot 0,421 + 29000 \cdot 0,0526 = 4953,68 \text{ Kcal/kg}$$

El PCI volumètric es calcula:

$$1 \text{ kg MIC} \cdot \frac{1 \text{ Kmol}}{57 \text{ kg MIC}} \cdot \frac{1000 \text{ mol}}{1 \text{ Kmol}} = 17,54 \text{ mol}$$

Es calcula el volum que ocupen aquets mols:

$$V = \frac{17,54 \cdot 0,082 \cdot 293}{1} = 421 \text{ l}$$

Així doncs la densitat del MIC gas en condicions estàndard és de 2,37 kg/m<sup>3</sup>.

$$PCI = 4953,68 \cdot 2,37 = \mathbf{11740,23 \text{ Kcal/m}^3}$$

Com que El poder calorífic inferior del MIC es superior al mínim necessari per a una bona combustió no caldrà de cap combustible auxiliar.

12.13.3.3.2 Alçada de la xemeneia

El disseny de la grandària de les torxes industrials es fa normalment per a una intensitat màxima de calor d'1,500-2,000 Btu/h-ft<sup>2</sup> (4066-5422 Kcal/h·m<sup>3</sup>) quan la combustió en la torxa està en la seva màxima capacitat de disseny. [ (12.13) 1,2 ] A aquest nivell d'intensitat de calor, els treballadors poden romandre en l'àrea de la torxa només per un temps limitat. Si, però, es requereix que el personal d'operació romangui en l'àrea de la unitat realitzant les seves funcions, el nivell de disseny de radiació recomanat és de 500 Btu/h-ft<sup>3</sup> (1355,66 Kcal/h·m<sup>3</sup>). La equació de Hajek y Ludwig es pot utilitzar per determinar la distancia mínima requerida des de el centre de la flama de la torxa i un punt d'exposició on s'ha de limitar la radiació tèrmica.

$$L = \sqrt{\frac{t \cdot f \cdot R}{4 \cdot \pi \cdot K}} \quad \text{Equació 12.13.3.2}$$

on:

L= Distància mínima requerida des de el centre de la flama



$t$ = fracció d'intensitat de calor transmesa

$f$ = fracció de calor radiat

$R$ = calor net alliberat.

$$R = Q \cdot PCI \quad \text{Equació 12.13.3.3}$$

$$R = Q \cdot PCI = 2151 \frac{m^3}{h} \cdot 11740 \frac{Kcal}{m^3} = 2,53 \cdot 10^7 \frac{Kcal}{h}$$

$K$ = radiació permesa. (Al utilitzar-se en cas d'emergència es considera que no hi ha operaris a la zona quan la torxa esta en funcionament, per tant  $K=4066 \text{ Kcal/h}\cdot\text{m}^3$ )

El disseny conservador utilitzat ignora l'efecte del vent i calcula la distancia suposant que el centre de la radiació està a la base de la flama i no al centre. També es suposa que el punt on s'ha de limitar la radiació és a la base de la torxa, per tant, la distancia calculada serà la altura requerida per a la torre de cremat. El factor  $f$  te en conte que no tot el calor alliberat a la flama pot ser alliberat com a radiació, en aquest cas com no es tenen dades s'utilitza un valor conservador de 0,2. Per a el valor de  $t$  tot i que la atmosfera no es un buit perfecte i part de la calor radiada s'absorbeix per la humitat partícules.. es pren un valor de 1 que vol dir que tot el calor radiat es transmès.

$$L = \sqrt{\frac{1 \cdot 0,2 \cdot 2,53 \cdot 10^7}{4 \cdot \pi \cdot 4066}} = 10 \text{ m}$$

La alçada de la xemeneia serà de 10 metres.

#### 12.13.3.3 Diàmetre del broquet del cremador

EL càlcul del diàmetre de la torxa es fa en funció de la velocitat del gas de sortida dels gasos de venteig, per a gasos amb PCI superiors a  $1000 \text{ BTU/ft}^3$  ( $8895 \text{ Kcal/m}^3$ ) la velocitat màxima es de  $400\text{ft/s}$  ( $122 \text{ m/s}$ ). Es calcula el diàmetre mínim per a una velocitat del gas del 80% del màxim.

$$D_{min} = 1,93 \cdot \sqrt{\frac{Q}{0,8 \cdot v_{max}}} \quad \text{Equació 12.13.3.4}$$

on:

$D_{min}$ = diàmetre mínim del broquet del cremador (m)

Q= Cabal de venteig ( $m^3/s$ )

$v_{max}$ = Velocitat màxima del gas de venteig

$$D_{min} = 1,93 \cdot \sqrt{\frac{0,59}{0,6 \cdot 122}} = 0,15 \text{ m} = 5,9 \text{ polsades}$$

El diàmetre que caldrà utilitzar serà el primer diàmetre comercial superior al calculat, en aquest cas de 6 polsades, Aquest també serà el diàmetre requerit per a la canonada.

#### 12.13.3.3.4 Requeriments de combustible per al cremador pilot

L'ús del gas per al pilot és una funció del nombre de cremadors requerits per assegurar una ignició positiva del gas a cremar, del disseny dels pilots i de la manera d'operació. El consum mitjà del gas per a cada pilot en base a un model de consum eficient d'energia és de  $70 \text{ ft}^3/\text{h}$  ( $2 \text{ m}^3/\text{h}$ ). Per a un diàmetre de broquet de 1 a 10 polsades el numero de cremadors pilot es de 1. Així doncs, el consum de combustible de la torxa serà de  $2 \text{ m}^3/\text{h}$ . Els requeriments anuals seran doncs de:

$$2 \frac{\text{m}^3}{\text{h}} \cdot \frac{24 \text{ h}}{1 \text{ dia}} \cdot \frac{300 \text{ dies}}{1 \text{ any}} = 14400 \frac{\text{m}^3}{\text{any}}$$

#### **12.13.4 Torre de venteig**

Aquesta torre de venteig te la finalitat de canalitzar el cabal de la possible fuga de MIC a una altura elevada per minimitzar el risc en cas de que el absorbidor AB-801 i la torre de cremat TC-801 no siguin capaces de tractar la totalitat de la fuga, donat aquest cas es prefereix canalitzar part del cabal total de fuga cap a una localització elevada evitant així una fuga a nivell de terra causada per la sobrepressió del sistema.

El diàmetre de la torre es calcula:

$$D = \sqrt{\frac{Q/v \cdot 4}{\pi}} \quad \text{Equació 12.13.4.1}$$

on:

D= diàmetre torre (m)

Q= cabal volumètric (m<sup>3</sup>/s)

Vv= velocitat del gas (10 m/s)

$$D = \sqrt{\frac{0,59/10 \cdot 4}{\pi}} = 0,27m$$

La altura de la torre serà 5 metres superior a la torre de cremat.

## 12.14 DISSENY D'EQUIPS DE SERVEI

### 12.14.1 Torre de Refrigeració

L'aigua provinent de la torre de refrigeració refredarà el cabal de toluè que s'utilitza en els equips C-301, C-601, C-602, BC-601, R-301, R-501 i R-502. A continuació es mostren les necessitats d'aquets equips.

*Taula 12.14.1.1 Equips amb requeriment de toluè refrigerat amb aigua de torre*

Equip	T entrada toluè (°C)	T sortida toluè (°C)	Cabal (Kg/s)
C-301	44	35	3,95
C-601	50	35	6,98
R-301	38	35	2,65
R-501	45	35	3,03
R-502	45	35	3,03
BC-601	35	60	2,97

La potència frigorífica requerida vindrà donada per el calor necessari que cal bescanviar per refredar el toluè de tots els equips des de la temperatura d'entrada al bescanviador BC-901 fins a la temperatura de 35°C, aquesta es calcula amb l'equació següent:

$$q = M_{\text{toluè}} \cdot Cp \cdot (T_{\text{entrada}} - T_{\text{sortida}}) \quad \text{Equació 12.14.1.1}$$

on:

q= calor a bescanviar (kJ/s)

M= Cabal màssic (kg/s)

Cp= calor específic del toluè a 35°C (kJ/kg·°C)

$T_{\text{sortida}}$  = Temperatura sortida toluè al BC-901 (°C)

$T_{\text{entrada}}$  = Temperatura entrada toluè del BC-901 (°C) =  $\frac{\sum Q_{\text{toluè}} \cdot T_{\text{entrada}}}{Q_{\text{toluè total}}} = 47,73^{\circ}\text{C}$

$$q = 1,737 \cdot 22,99 \cdot (47,73 - 35) = 508,06 \text{ kJ/s}$$

Per a calcular la potència frigorífica de la torre es sobredimensiona el calor a bescanviar un 25%.

$$P = 1,25 \cdot q$$

$$P = 1,25 \cdot 508,06 = \mathbf{635,07 \text{ KW}}$$

La torre escollida per a realitzar el bescanvi de calor es de la casa EWK concretament el model EWK-I 680 amb una potència frigorífica de 798 KW.

Tot i que amb una torres de refrigeració es cobreixen les necessitats es decideix instal·lar una segona torre, ja que en el cas que falles no es podrien satisfer les necessitats de fred d'aquets equips.La potencia de treball de cada torre respecte el màxim serà de:

$$W_{torre}(\%) = \frac{635,07/2}{798} \cdot 100 = 40\%$$

El cabal d'aigua necessari es calcula amb l'equació següent:

$$M_{aigua} = \frac{q}{C_p \cdot T_{sortida} - T_{entrada}} \quad \text{Equació 12.14.1.2}$$

on:

M= Cabal d'aigua de torre (kg/s)

q= Calor per bescanviar (kJ/s)

Cp= Calor específic de l'aigua (4,18 KJ/kg·°C)

$T_{sortida}$ = Temperatura de retorn a la torre de refrigeració (35°C)

$T_{entrada}$ = Temperatura de sortida de la torre (30°C)

$$M = \frac{508,06}{4,18 \cdot (40 - 35)} = 24,31 \text{ kg/s}$$

Les torres de refrigeració pateixen pèrdues d'aigua per la evaporació d'aquesta i per l'arrossegament en forma de gotes degut a la circulació d'aire en contracorrent, a més a més s'ha de realitzar una purga per a evitar l'acumulació de sals, microorganismes.. La suma d'aquestes pèrdues serà el cabal que caldrà afegir a la torre.

Pèrdues per evaporació

$$M_{evap} = \frac{q}{\lambda} \quad \text{Equació 12.14.1.3}$$

on:

$M_{evap}$  = Cabal màssic d'aigua evaporat (kg/s)

q = Calor intercanviat (KW)

$\lambda$  = Calor latent de vaporització de l'aigua a 40°C (kJ/kg)

$$M_{evap} = \frac{508,06}{2422,7} = 0,21 \text{ kg/s}$$

El cabal per cada torre serà:

$$M_{evap \text{ torre}} = \frac{M_{evap}}{n^{\circ} \text{ torres}} = \frac{0,21}{2} = 0,105 \text{ kg/s} = 378 \text{ kg/h}$$

### Pèrdues per arrossegament

Es considera que un 0,01% del cabal d'aigua en circulació es perd per arrossegament en forma de gotes.

$$M_g = 0,0001 \cdot M$$

on:

$M_g$  = Cabal arrossegat en forma de gotes (kg/h)

$M$  = cabal d'aigua en circulació (kg/h)

$$M_g = 0,0001 \cdot 87511 = 8,75 \text{ kg/h}$$

El cabal de pèrdues en forma de gota de cada torre serà:

$$M_{g \text{ torre}} = \frac{M_g}{n^{\circ} \text{ torres}} = \frac{8,75}{2} = 4,38 \text{ kg/h}$$

### Cabal de purga

La evaporació constant de part de l'aigua en circulació fa que la concentració dels ions dissolts augmenti, aquest augment dona lloc a un augment de la salinitat que poden afavorir incrustacions i corrosió, també es dona l'augment de microorganismes que poden donar lloc a problemes de contaminació de l'aigua. Tot i efectuar-se tractaments químics amb biocides, algicides i antiincrustants es requereix de una purga constant de l'aigua en circulació, el cabal de purga es calcula:

$$M_p = \frac{M_{evap}}{C.C-1} \quad \text{Equació 12.14.1.4}$$

on:

$M_p$  = Cabal de purga (kg/h)

$M_{evap}$  = Cabal d'aigua evaporada (kg/h)

C.C. = Cicle de concentració (100)

$$M_p = \frac{754,94}{C.C - 1} = 7,63 \text{ kg/h}$$

El cabal de purga per cada torre serà:

$$M_p = \frac{M_p}{n^{\circ} \text{ torres}} = \frac{7,63}{2} = 3,82 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

#### Aigua de reposició

El cabal de reposició final serà la suma del tres cabals:

$$M_{rep} = M_{evap} + M_g + M_p$$

$$M_{rep} = 754,94 + 8,75 + 7,62 = 771,32 \text{ kg/h}$$

El cabal de reposició per cada torre serà:

$$M_{rep} = \frac{M_{rep}}{n^{\circ} \text{ torres}} = \frac{771,32}{2} = 385,66 \text{ kg/h}$$

### 12.14.2 Grup de fred (Chiller)

Per als bescanviadors BC-303, BC-501 i BC-502, i condensadors C-302, C-303, C-401, C-402 i C-403 es requereix de toluè a temperatures de -10 i 15°C, temperatures inferiors a les que es poden assolir amb una torre de refrigeració, per això es requereix de chillers per obtenir un fluid a -15°C, en aquest cas s'utilitza aigua glicolada al 40% en pes ja que té un punt de congelació de -22,3°C, amb el que es refredarà el toluè en els bescanviadors de calor BC-902 per a obtenir toluè a -10°C i amb el BC-903 per a obtenir toluè a 15°C.

Els equips que requereixen de toluè a -10 i 15 °C es mostren a continuació, també s'inclou el C-402 que aprofita una part del cabal de sortida del C-401.

**Taula 12.14.2.1** Equips amb requeriment de toluè refrigerat amb chiller

Equip	T entrada toluè (°C)	T sortida toluè (°C)	Cabal (Kg/s)
BC-303	2	-10	5,64
BC-502	-8	-10	2,27
C-302	-2	-10	8,39

C-303	-3	-10	5,39
C-401	6	-10	8,21
T-101/102	-5	-10	3,22
T-103/104	-5	-10	3,89
C-402	7	6	1,93
C-403	30	15	3,84
BC-501	16	15	1,97
C-602	48,42	15	8,33

La potència frigorífica requerida del chiller serà la suma del calor a bescanviar en el BC-902 i BC-903.

$$q_{tot} = M_{toluè BC-902} \cdot Cp_{toluè -10^{\circ}C} \cdot (T_{entrada toluè BC-902} - T_{sortida toluè BC-902}) + M_{toluè BC-903} \cdot Cp_{toluè 15^{\circ}C} \cdot (T_{entrada toluè BC-903} - T_{sortida toluè BC-903})$$

**Equació 12.14.2.1**

on:

q= calor a bescanviar (kJ/s)

M= Cabal màssic (kg/s)

Cp= calor específic (kJ/kg·°C)

$$T_{entrada BC-902} = \text{Temperatura entrada toluè del BC-902 (}^{\circ}\text{C)} = \frac{\sum Q_{toluè} \cdot T_{entrada}}{Q_{toluè total}} = -0,32^{\circ}\text{C} \quad \text{Equació 12.14.2.2}$$

$$T_{entrada BC-903} = \text{Temperatura entrada toluè del BC-903 (}^{\circ}\text{C)} = \frac{\sum Q_{toluè} \cdot T_{entrada}}{Q_{toluè total}} = 38,90^{\circ}\text{C} \quad \text{Equació 12.14.2.3}$$

$$q_{tot} = 31,83 \cdot 1,606 \cdot (0,72 + 10) + 14,14 \cdot 1,675 \cdot (38,90 - 15) = 976,67 \text{ kJ/s}$$

Per a calcular la potència frigorífica del chiller es sobredimensiona el calor a bescanviar un 25%.

$$P = 1,25 \cdot q$$

$$P = 1,25 \cdot 976,67 = \mathbf{1220,84 \text{ KW}}$$



El cabal d'aigua glicolada necessària per al BC-902 i el BC-903 es calculen amb l'equació següent:

$$M_{\text{aigua glicolada}} = \frac{q_{BC-902/BC-903}}{C_p \cdot T_{\text{sortida}} - T_{\text{entrada}}} \quad \text{Equació 12.14.2.4}$$

on:

M= Cabal d'aigua de torre (kg/s)

q= Calor per bescanviar (kJ/s)

C<sub>p</sub>= Calor específic de l'aigua glicolada (3,36 KJ/kg·°C)

T<sub>sortida</sub>= Temperatura de sortida del bescanviador (°C)

T<sub>entrada</sub>= Temperatura de entrada al bescanviador (°C)

El cabal d'aigua glicolada per el BC-902 és de:

$$M = \frac{548,28}{3,36 \cdot (-11 + 15)} = 45 \text{ kg/s}$$

I per al BC-903 és de:

$$M = \frac{371,29}{3,36 \cdot (-11 + 15)} = 27,63 \text{ kg/s}$$

Per a proporcionar la potència frigorífica s'ha escollit un chiller de la casa Carrier, concretament el model 30XW 400 amb una potència de 1354 KW i una capacitat de 385Tn.

Tot i que amb 1 chiller es cobreixen les necessitats es decideix instal·lar un segon chiller i d'aquesta manera si un dels dos falles es podria continuar operant. Cada chiller tractaria un cabal de 36,34 kg/s.

Cada chiller treballarà a una potencia respecte a la màxima possible de:

$$W_{\text{chiller}}(\%) = \frac{1220,84/2}{1354} \cdot 100 = 45\%$$

### 12.14.3 Caldera

Els requeriments de calor a la planta es satisfan amb calderes que escalfen oli tèrmic Therminol 55 fins a 150 i 300 °C. Al tenir dos temperatures d'entrada d'oli als diferent equips caldrà com a mínim tindre dos calderes, una amb la que s'obté oli tèrmic a 300°C i una altre a 150°C.

A continuació es presenten els equips amb requeriments d'oli tèrmic a 150, també s'inclouen el BC-601, el BC-602 i el BC-603 que aprofiten part del cabal de sortida del CR-601, CR-602 i CR-603.

**Taula 12.14.3.1** Equips amb requeriment de oli tèrmic a 150°C

Equip	T entrada oli (°C)	T sortida oli (°C)	Cabal oli tèrmic (kg/s)
EV-301	143	150	4,48
EV-302	140	150	2,44
EV-401	140	150	5,94
EV-601	135	150	7,44
CR-601	140	150	14,19
CR-602	140	150	0,47
CR-603	140	150	1,95
TM-502	140	150	0,00042
BC-602	130	140	0,58
BC-603	138	140	0,13

La potència tèrmica necessària de la caldera per obtindre oli tèrmic a 150°C vindrà donada per el calor necessari que cal bescanviar per escalfar el toluè de tots els equips des de la temperatura d'entrada a la caldera fins a 150°C, el cabal del BC-602 i BC-603 no es tindran en compte ja que son corrents reaprofitats.

$$q = M_{oli\ tèrmic} \cdot Cp \cdot (T_{sortida} - T_{entrada}) \quad \text{Equació 12.14.3.1}$$

on:

q= calor a bescanviar (kJ/s)

M= Cabal màssic (kg/s)

Cp= calor específic del oli (kJ/kg·°C)

$$T_{entrada} = \text{temperatura entrada a la caldera (°C)} = \frac{\sum Q_{oli} \cdot T_{entrada}}{Q_{oli\ total}} = 139,2 \text{ °C}$$

$$T_{sortida} = \text{temperatura de sortida de la caldera (°C)}$$

$$q = 36,9 \cdot 2,05 \cdot (150 - 139,2) = \mathbf{817,68 \text{ kJ/s}}$$

Per a calcular la potència tèrmica de la caldera es sobredimensiona el calor a bescanviar un 25%.

$$P = 1,25 \cdot q$$

$$P = 1,25 \cdot 817,68 = \mathbf{1022,10 \text{ KW}}$$

Per a proporcionar aquesta potència s'ha escollit una caldera de la casa ATTSU, concretament el model FT-1000 amb una potència de 1163 KW

Tot i que amb 1 caldera es cobreixen les necessitats es decideix instal·lar una segona caldera i d'aquesta manera si una de les dos falles es podria continuar operant.

D'aquesta manera cada caldera treballarà a una potència respecte la màxima possible de:

$$W_{Caldera}(\%) = \frac{1022,10/2}{1163} \cdot 100 = 44\%$$

Com a combustible s'utilitza gas natural, la quantitat necessària es calcula:

$$Q_{gas \text{ natural}} = \frac{P}{PCI_{gas \text{ natural}} \cdot \varphi} \cdot 3600 \quad \text{Equació 12.14.3.2}$$

on:

Q= cabal volumètric (m<sup>3</sup>/h)

P= Potència (KW)

PCI= poder calorífic inferior (37600 KJ/m<sup>3</sup>)

$\varphi$ = rendiment (es considera del 85%)

$$Q_{gas \text{ natural}} = \frac{1022}{37600 \cdot 0,85} \cdot 3600 = \mathbf{115,11 \text{ m}^3/\text{h}}$$

Els equips que requereixen oli tèrmic a 300°C són:

**Taula 12.14.3.2** Equips amb requeriment de oli tèrmic a 300°C

Equip	T entrada oli (°C)	T sortida oli (°C)	Cabal oli tèrmic (kg/s)
BC-301	292	300	1,59
BC-302	290	300	1,19
EV-303	290	300	1,75
EV-304	290	300	3,65

La potència tèrmica necessària de la caldera per obtindre oli tèrmic a 300°C vindrà donada per el calor necessari que cal bescanviar per escalfar el toluè de tots els equips des de la temperatura d'entrada fins a 300°C.

$$q = M_{oli\ tèrmic} \cdot Cp \cdot (T_{sortida} - T_{entrada}) \quad \text{Equació 12.14.3.3}$$

on:

q= calor a bescanviar (kJ/s)

M= Cabal màssic (kg/s)

Cp= calor específic del oli (kJ/kg·°C)

$$T_{entrada} = \text{temperatura entrada a la caldera (°C)} = \frac{\sum Q_{oli} \cdot T_{entrada}}{Q_{oli\ total}} = 290,39 \text{ °C}$$

$$T_{sortida} = \text{temperatura de sortida de la caldera (°C)}$$

$$q = 3,7 \cdot 2,36 \cdot (300 - 290,39,44) = \mathbf{185,48 \text{ kJ/s}}$$

Per a calcular la potència tèrmica de la caldera es sobredimensiona el calor a bescanviar un 25%.

$$P = 1,25 \cdot Q$$

$$P = 1,25 \cdot 185,48 = \mathbf{231,86 \text{ KW}}$$

Per a proporcionar aquesta potència s'ha escollit també una caldera de la casa ATTSU, en aquest cas el model FT-300 amb una potència de 349 KW

Tot i que amb 1 caldera es cobreixen les necessitats es decideix instal·lar una segona caldera i d'aquesta manera si una de les dos falles es podria continuar operant sense problemes.

D'aquesta manera cada caldera treballarà a una potència respecte la màxima possible de:

$$W_{caldera}(\%) = \frac{231,86/2}{349} = 33\%$$

Com a combustible s'utilitza gas natural, la quantitat necessària es calcula:

$$Q_{gas\ natural} = \frac{P}{PCI_{gas\ antural} \cdot \varphi} \cdot 3600 \quad \text{Equació 12.14.3.4}$$

on:

Q= cabal volumètric (m<sup>3</sup>/h)

P= Potència (KW)

PCI= poder calorífic inferior (37600 KJ/m<sup>3</sup>)

φ= rendiment (es considera del 85%)

$$Q_{gas\ natural} = \frac{231,86}{37600 \cdot 0,85} \cdot 3600 = 26,12\ m^3/h$$

#### 12.14.4 Electricitat

A la planta es disposa de un grup electrogen per a assegurar la continuïtat del subministrament elèctric de equips, sala de control, serveis il·luminació...

A continuació es presenta el consum energètic dels equips més importants per a el procés de producció.

*Taula 12.14.4.1 Consum energètic dels equips de la planta.*

	<b>Equip</b>	<b>P (KW)</b>
<b>Àrea 100</b>	Bombas	3,97
<b>Àrea 300</b>	CO-301/301A	30,40
	Bombas	0,55
<b>Àrea 400</b>	AG-401	16,00
	AG-402	16,00
	Bombas	0,17
<b>Àrea 500</b>	AG-501	0,30
	AG-502	0,30
	AG-503	0,40
	Bombas	0,86
<b>Àrea 600</b>	BB-601	2,50
	CT-601	7,50
	CT-602	7,50
	CT-603	5,50
	CT-604	5,50
	AG-601	0,02
	A-601	35,00
	A-602	35,00
	Bombas	0,09
<b>Àrea 800</b>	AG-801	0,37
<b>Àrea 900</b>	GF-901	242,80
	GF-902	242,80
	TR-901	22,50
	TR-902	22,50
	CO-901	7,50
	Bombas	18,63
<b>Total</b>		<b>724,66</b>

Per altre banda les necessitat d'il·luminació de planta són:

**Taula 12.14.4.2** Necessitats d'il·luminació de la planta

	Descripció de la zona	Àrea (m2)	P (Lux)	P (W/m2)	P (KW)
<b>Àrea 100</b>	Emmagatzematge matèries primeres	4780	200	10	47,80
<b>Àrea 200</b>	Emmagatzematge de producte	693	200	10	6,93
<b>Àrea 300</b>	Reacció de formació de MCC	299	500	25	7,48
<b>Àrea 400</b>	Reacció de formació de MIC	255	500	25	6,38
<b>Àrea 500</b>	Reacció de formació de Carbaryl	180	500	25	4,50
<b>Àrea 600</b>	Purificació	357	500	25	8,93
<b>Àrea 700</b>	Emmagatzematge de MIC	4131	200	10	41,31
<b>Àrea 800</b>	Neutralització de MIC	196	200	10	1,96
<b>Àrea 900</b>	Serveis	583	500	25	14,58
<b>Àrea 1000</b>	Tractament de residus	341	500	25	8,53
<b>Àrea 1100</b>	Protecció contra incendis	1687	100	5	8,44
<b>Àrea 1200</b>	Carrega i descarrega	5147	200	10	51,47
<b>Àrea 1300</b>	Sala de control	354	1000	50	17,70
<b>Àrea 1400</b>	Laboratoris	451	1000	50	22,55
<b>Àrea 1500</b>	Oficines	1658	1000	50	82,90
<b>Àrea 1600</b>	Pàrquing	1873	50	2,5	4,68
<b>Àrea 1700</b>	Magatzem	905	200	10	9,05
<b>Àrea 1800</b>	Primers auxilis	79	1000	50	3,95
				<b>total</b>	<b>349,11</b>

S'obté doncs un consum total de 1073, 77 KW, degut a que no es precisa de dades de consum d'alguns equips es sobredimensiona aquest valor un 25%. Es considera doncs que el consum de la planta serà de 1345 KW.

Amb un factor de potència de 0,8 tenim que:

$$P_{KVA} = \frac{1345}{0,8} = 1681,25 \text{ KVA}$$

El grup electrogen del que es disposa per es de la casa FGWilson, concretament el model P1925E amb una capacitat elèctrica de 1925 KVA.

