



UAB

Universitat Autònoma
de Barcelona

PLANTA DE PRODUCCIÓ DE PARACETAMOL



Projecte Final de Carrera

Enginyeria química 2009

VOLUM IV

Sergi Domínguez Gómez

Javier Domínguez Martín

Mabel Mora Garrido

Marc Oller Balcells

Queralt Tobarra García

Tutor: Javier Lafuente

12/06/2009

11. MANUAL DE CÀLCUL

11.1	DISSENY DELS TANCS D'EMMAGATZEMATGE DE REACTIUS.....	11-7
11.1.1	<i>Disseny dels tancs d'emmagatzematge del fenol.</i>	11-7
11.1.2	<i>Disseny dels tancs d'emmagatzematge de l'acètic anhidre.....</i>	11-17
11.1.3	<i>Disseny dels tancs d'emmagatzematge d'àcid sulfúric al 67%.</i>	11-19
11.1.4	<i>Disseny dels tancs d'emmagatzematge d'àcid nítric al 65%.</i>	11-22
11.1.5	<i>Disseny del tanc d'emmagatzematge n-pentà.</i>	11-24
11.1.6	<i>Disseny dels tancs d'emmagatzematge d'àcid acètic glacial.....</i>	11-26
11.1.7	<i>Disseny dels tancs d'emmagatzematge de l'hidròxid sòdic al 50% ...</i>	11-28
11.1.8	<i>Disseny de sitges d'emmagatzematge de reactius sòlids.....</i>	11-30
11.2	DISSENY DE REACTORS.....	11-36
11.2.1	<i>Disseny del reactor de formació d'òxids de nitrogen (R-302)</i>	11-36
11.2.2	<i>Disseny del reactor de formació d'àcid nítric (HNO₂) (R-301).....</i>	11-49
11.2.3	<i>Disseny del reactor de nitració (R-401/402/403).....</i>	11-58
11.2.4	<i>Disseny del reactor de hidrogenació/acetilació (R-701).....</i>	11-72
11.2.5	<i>Disseny del reactor de neutralització d'àcids (R-501).....</i>	11-86
11.3	DISSENY DE COLUMNES DE DESTIL·LACIÓ.....	11-92
11.3.1	<i>Disseny de la columna de destil·lació d'acètic i aigua (C-701)</i>	11-92
11.3.2	<i>Disseny de la columna de destil·lació flash (S-801).....</i>	11-97
11.4	DISSENY DELS CRISTAL·LITZADORS	11-101
11.4.1	<i>Disseny del cristal·litzador de para-nitrofenol (CR-601).....</i>	11-101
11.4.2	<i>Disseny dels cristal·litzadors de paracetamol (CL-801/CL-802)</i>	11-110
11.5	DISSENY DE LA COLUMNA D'EXTRACCIÓ (C-501)	11-115
11.6	DISSENY DE LA COLUMNA D'ARRASTRE PER VAPOR (C-601)	11-118
11.7	DISSENY DELS TANCS PULMÓ	11-130

11.7.1	<i>Disseny del tanc pulmó de para-nitrofenol (T-401)</i>	11-130
11.7.2	<i>Disseny del tanc d'emmagatzematge de NO_x (T-302)</i>	11-133
11.8	DISSENY D'ASSECADORS (AR-601, AB-801, AB-802)	11-137
11.8.1	<i>Disseny de l'assecador rotatori AR-601</i>	11-137
11.8.2	<i>Disseny de l'assecador al buit (AB-801, AB-802)</i>	11-141
11.9	DISSENY DE CICLONS (CI-601, CI-602)	11-147
11.10	KETTLE-REBOILER (E-501, E-701)	11-152
11.11	CONDENSADORS (E-502, E-504 I E-604)	11-167
11.12	INTERCANVIADORS DE CALOR DE CARCASSA I TUBS (E-503)	11-176
11.13	INTERCANVIADORS DE CALOR DE DOBLE TUB (E-601/602, E-801/803)	11-185
11.14	SEPARADOR DE FASES (S-502)	11-192
11.15	DISSENY DELS TANCS D'EMMAGATZEMATGE DE PRODUCTES I SUBPRODUCTES	11-194
11.15.1	<i>Disseny de la sitja de paracetamol</i>	11-194
11.15.2	<i>Disseny dels tancs d'emmagatzematge d'àcid acètic al 65%</i>	11-195
11.16	DISSENY D'EQUIPS DE SERVEI	11-197
11.16.1	<i>Grup de fred per l'aigua glicolada</i>	11-198
11.16.2	<i>Torre de refrigeració</i>	11-199
11.16.3	<i>Chiller per aigua descalcificada</i>	11-199
11.16.4	<i>Consum d'energia elèctrica</i>	11-200
11.17	CÀLCUL DE BOMBES I COMPRESSORS	11-201
11.17.1	<i>Bombes</i>	11-201
11.17.2	<i>Compressors</i>	11-204

11.1 DISSENY DELS TANCS D'EMMAGATZEMATGE DE REACTIUS

11.1.1 Disseny dels tancs d'emmagatzematge del fenol.

En aquests tancs s'emmagatzema el fenol necessari per la planta. El cabal que es necessita per a arribar a la producció de paracetamol fixada és de $16,6 \text{ m}^3/\text{dia}$ de fenol. El reactiu arriba a la planta en camions de 30 m^3 de l'empresa Cepsa (Palos de la Frontera, Huelva). Es dissenyen tres tancs d'emmagatzematge d'uns 20 m^3 perquè puguin contenir una quantitat de reactiu suficient per tres dies de funcionament de la planta. Gràcies a això, s'evita l'aturada del procés si algun dia es tenen problemes amb el subministrament de fenol. A continuació, es realitza el càlcul de la quantitat de camions necessaris cada setmana per emmagatzemar la quantitat desitjada:

$$16,6 \frac{\text{m}^3}{\text{dia}} \cdot \frac{1 \text{ camió}}{30 \text{ m}^3} \cdot \frac{7 \text{ dies}}{1 \text{ setmana}} = 3,9 \frac{\text{camions}}{\text{setmana}} \rightarrow 4 \text{ camions}$$

S'observa que a la setmana fan falta 4 camions de 30 m^3 de fenol. Ara es realitza el càlcul del volum de tancs necessari per emmagatzemar el fenol:

$$16,6 \frac{\text{m}^3}{\text{dia}} \cdot 3 \text{ dies} = 49,8 \text{ m}^3$$

Els tancs d'emmagatzematge se sobredimensionen un 20% obtenint, per tant, el volum total següent:

$$49,8 \text{ m}^3 \cdot (0,2 + 1) \approx 60 \text{ m}^3$$

A continuació es presenten les dimensions dels tancs d'emmagatzematge per a obtenir un volum de $20 \text{ m}^3/\text{tanc}$:

Taula 11.1. Dimensions dels tancs d'emmagatzematge de fenol

Paràmetres	Valors
Diàmetre (m)	2,1
Alçada del tanc (m)	5,8
Alçada del líquid (m)	4,8

El percentatge de líquid que hi ha en el reactor és de:

$$V_{\text{líquid}} = \frac{\pi}{4} \cdot D^2 \cdot h = \frac{\pi}{4} \cdot (2,1\text{m})^2 \cdot 4,8\text{m} = 16,6\text{m}^3$$

$$V_{\text{tanc}} = \frac{\pi}{4} \cdot D^2 \cdot h = \frac{\pi}{4} \cdot (2,1\text{m})^2 \cdot 5,8\text{m} = 20\text{m}^3$$

$$\%ocupat = \frac{16,6\text{m}^3}{20\text{m}^3} \cdot 100 = 83\%$$

- **Disseny mecànic dels tancs de fenol**

Aquests tancs es dissenyen seguint la normativa ASME i la norma MIE-APQ-001, sobre l'emmagatzematge de líquids inflamables i combustibles.

- **Material de construcció**

El material que s'utilitza per a la construcció dels tancs d'emmagatzematge de fenol és l'acer inoxidable AISI304. Aquest tipus d'acer està classificat com a "excellent" segons la *Chemical Resistance Guide (Harrington Plastics)* per a aquest compost.

- **Disseny dels recipients a pressió**

Primer de tot, s'ha de conèixer la pressió que exerceix l'alçada del líquid dintre del reactor. Aquesta pressió li serà sumada a la pressió atmosfèrica i d'aquesta forma s'obté la pressió de disseny.

$$\Delta P = \rho \cdot g \cdot h = 1070 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} \cdot 9,81 \frac{\text{m}}{\text{s}^2} \cdot 4,8\text{m} = 50384\text{Pa} = 0,5\text{atm}$$

El sobredimensionament de la pressió de disseny és el 15% de la pressió corresponent a l'alçada del líquid més la pressió a la part superior del tanc, en aquest cas, la pressió atmosfèrica.

$$P_{disseny} = P_{atm} + \Delta P + (P_{atm} + \Delta P) \cdot 0,15 = 1atm + 0,5atm + (1atm + 0,5atm) \cdot 0,15 = 1,73atm$$

- **Temperatura de disseny**

La temperatura de fusió del fenol és de 40°C. El tanc d'emmagatzematge haurà d'estar a 50°C i a més es parla amb els proveïdors per a que la cisterna de reactiu que arriba a la planta estigui a aquesta mateixa temperatura.

Per mantenir constant la temperatura, a més d'introduir en el tanc un serpentí, s'haurà de revestir la superfície del mateix amb un material aïllant.

- **Disseny del serpentí**

Amb el programa informàtic de l'empresa Isover, s'introdueixen les dades del tanc d'emmagatzematge més les dades de l'aïllant. El resultat són unes pèrdues de $Q=91W/m^2$, aquesta és l'energia que haurà de donar el serpentí.

Les característiques físiques del serpentí es calculen a continuació:

$$m_{líquid} = \frac{Q_{sup} \cdot A}{C_p \cdot \Delta T} = \frac{91 \frac{W}{m^2} \cdot \pi \cdot 2,1m \cdot 4,8m}{4180 \frac{J}{Kg \cdot K} \cdot (343 K - 338 K)} = 0,14 \frac{Kg}{s}$$

$$A_{serpentí} = \frac{\pi}{4} \cdot d^2 = \frac{\pi}{4} \cdot (0,01m)^2 = 7,85 \cdot 10^{-5} m^2$$

$$v = \frac{Q_V}{A_{serpentí}} = \frac{0,14 \frac{kg}{s} \cdot \frac{1L}{1,07kg} \cdot \frac{1m^3}{1000L}}{7,85 \cdot 10^{-5} m^2} = 1,64 \frac{m}{s}$$

$$A_{bescanvi} = \frac{Q}{U \cdot \Delta T_{ml}} = \frac{91 \frac{W}{m^2} \cdot \pi \cdot 2,1m \cdot 4,8m}{900 \frac{W}{m^2} \cdot 17,38k} = 0,18m^2$$

$$L_{serpentí} = \frac{A_{bescanvi}}{\pi \cdot d} = \frac{0,18m^2}{\pi \cdot 0,01m} = 5,85m$$

$$\Delta T_1 = 343K - 323K = 20K$$

$$\Delta T_2 = 338K - 323K = 15K$$

$$\Delta T_{ml} = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln\left(\frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}\right)} = \frac{20K - 15K}{\ln\left(\frac{20K}{15K}\right)} = 17,38K$$

El diàmetre de cadascuna de les voltes del serpentí és de 1 m, llavors:

$$L_{1volta} = \pi \cdot d = \pi \cdot 1m = 3,14m$$

$$n^\circ \text{ voltes} = \frac{5,85m}{3,14m} \approx 2 \text{ voltes}$$

Amb el número de voltes, el diàmetre del tub i la distància entre volta i volta (es deixa una distància de 1,5 cm entremig de cada volta) es pot saber l'alçada total que ocupa el serpentí (h):

$$h = 2 \text{ voltes} \cdot (0,02m + 0,015m) = 0,05m$$

- **Càlcul dels gruixos del tanc**

Els gruixos dels tancs es calculen en funció de la pressió interna a la que estan sotmesos. Aquests tancs no reben cap pressió externa que pugui afectar a la resistència del material.

○ **Part cilíndrica**

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

on:

- *P*.- Pressió de disseny (1,7 atm).
- *R*.- Radi intern del tanc (1050 mm).
- *E*.- Factor de soldadura (0,85).
- *S*.- Límit elàstic (1726,7 atm).
- *C*₁.- Tolerància a la corrosió (1,5mm).
- *C*₂.- Tolerància a la fabricació (1mm).

El gruix teòric del tanc és de 3,08 mm. Segons la bibliografia (Sinnott R.K., 1983), per a un diàmetre de recipient d'aproximadament 2m, s'hauria d'aplicar un gruix de 7mm. Com que aquest gruix no s'empra i a més té contemplats 2mm de gruix per tolerància a la corrosió, es fa servir un gruix de 6mm per al cos cilíndric del tanc d'emmagatzematge.

○ **Capçal superior semiesfèric**

$$t = \frac{P \cdot R}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2$$

on:

- *P* = Pressió de disseny (1,15 atm).
- *R* = Radi intern del tanc (1050 mm).
- *E* = Factor de soldadura (0,85).
- *S* = Límit elàstic (1726,7 atm).

La pressió de disseny pel capçal superior és igual a la pressió atmosfèrica sobredimensionada en un 15% degut a que aquesta xapa no haurà que suportar el pes de la columna de líquid. El gruix teòric és de 2,07 mm així que s'escull un gruix de 5mm mínim per al capçal superior del tanc.

- **Fons inferior pla**

El fons dels tancs d'emmagatzematge és pla i recolzat a terra, per tant, el gruix no dependrà en aquest cas de la columna de líquid que hagi de suportar sinó de la normativa que s'ha de seguir per aquest tipus de fons. Bibliogràficament (Sinnott R.K., 1983) està contemplat un gruix mínim de 6,5mm més la tolerància a la corrosió (C_1) que és de 1,5 mm. El gruix del fons pla és el següent:

$$t = 6,5mm + C_1 = 8mm$$

- **Càlcul del pes del tanc**

Pera a fer el càlcul del pes del tanc s'ha de mirar quin és el pes de cadascuna de les parts que els componen:

- **Pes del capçal inferior pla.**

$$P_{fons} = A_{cilindre} \cdot \rho_{acer} \cdot t = \frac{\pi}{4} \cdot (2,1m)^2 \cdot 7900 \frac{Kg}{m^3} \cdot 0,008m = 218,9Kg$$

on:

- ρ_{acer} .- densitat de l'acer AISI304 (7900 Kg/m³)
- t .- gruix del fons del tanc (8mm)

- **Pes del capçal superior**

El pes d'acer del capçal superior s'obté a partir del volum d'acer que té el capçal i de la densitat de l'acer. El volum d'acer es calcula com la diferència entre el volum extern, és a dir, aquell que resulta de considerar el radi intern i el gruix de la xapa d'acer (t), i el volum intern de la semiesfera.

$$P_{fons} = \frac{4}{6} \cdot \pi \cdot ((r+t)^3 - r^3) \cdot \rho_{acer} = \frac{4}{6} \cdot \pi \cdot ((1,05m + 0,005m)^3 - (1,05m)^3) \cdot 7900 \frac{kg}{m^3} = 274,93kg$$

○ **Pes del cilindre.**

$$P_{cilindre} = \pi \cdot D \cdot h \cdot \rho_{acer} \cdot t = \pi \cdot 2,1m \cdot 5,8m \cdot 7900 \frac{Kg}{m^3} \cdot 0,006m = 1810,9Kg$$

on:

- h .- alçada del tanc (m).
- ρ_{acer} .- densitat de l'acer AISI304 (7900 Kg/m³).

El recipient totalment buit tindrà un pes igual al sumatori de pesos de cadascuna de les parts del mateix:

$$Pes\ del\ tan\ c = P_{cilindre} + P_{capçals} = 1810,9Kg + 274,93Kg + 218,9Kg = 2304,7Kg$$

○ **Càlcul del pes del tanc en operació**

A més del pes de la xapa del tanc, també se sumarà el pes del fluid.

$$P_{fenol} = P_{tan\ c} + V_{fenol} \cdot \rho_{fenol} = 2304,7Kg + 16,6m^3 \cdot 1070 \frac{Kg}{m^3} = 20064,7Kg$$

On:

- ρ_{fenol} .- densitat del fenol (1070 Kg/m³)
- V_{fenol} .- volum de líquid (16,6 m³)

• **Aïllant tèrmic**

Els tancs d'emmagatzematge es trobaran a l'exterior i, per tant, es decideix instal·lar un aïllant tèrmic. D'aquesta manera es podrà assegurar la temperatura correcta a l'interior del recipient.

El fenol ha de tenir una temperatura superior a 40°C, en tot moment, perquè si baixa del seu punt de fusió es forma un sòlid amb la conseqüent sedimentació i acumulació de fenol al fons del tanc. El càlcul de l'aïllant tèrmic es realitza mitjançant un programa informàtic de la empresa Isover anomenat Induver.

Per a obtenir el resultat, el programa necessita les següents dades: la temperatura interior al tanc (50 °C), temperatura ambiental (0 ° C, s'ha d'introduir aquest valor per realitzar els càlculs a les condicions més desfavorables), també demana la temperatura a la que estarà la superfície de l'aïllant, la velocitat del vent,... S'ha triat aïllant BX SPINTEX 613-40 i revestiment superior d'alumini brillant.

L'aplicació d'aquest software dóna com a resultat una necessitat d'aïllant tèrmic de 10mm de gruix. A nivell comercial, però, se subministra amb un gruix de 30mm, de manera que es tria aquest gruix.

- **Disseny de la cubeta de retenció**

Els tancs d'emmagatzematge de líquids inflamables i corrosius, requereixen de la presència d'una cubeta de retenció. La funció d'aquesta és evitar la dispersió del líquid en cas de ruptura del tanc.

A partir de les ITC MIE APQ-001 i 006 es determinen les distàncies entre equips, distàncies entre tancs o uns altres equips de procés, l'altura mínima de la cubeta,...etc.

El fons de la cubeta ha de tenir una certa inclinació per a que el líquid sigui desplaçat la major distància possible dels altres tancs o equips de procés.

Les dimensions de la cubeta han de seguir els requisits explicats a les APQ (*almacenamiento de productos químicos*). Els càlculs a realitzar són: volum, amplada, alçada i llargada de la cubeta

- **Volum de la cubeta.**

El volum de la cubeta, seguint les indicacions APQ, s'ha de calcular de dues formes diferents de manera que, aquella que proporcioni una major capacitat serà la que s'hagi d'escollir:

- 10% de la capacitat total dels tancs
- El 100% d'un dels tancs.

Per a aquesta empresa la opció escollida és la del 100% d'un dels tancs; la primera opció seria per les empreses que tenen un nombre més elevat de tancs.

○ **Llargada de la cubeta.**

$$Ll\ arg\ ada = \frac{N_{\tan cs}}{2} \cdot D + S_{\tan cs} \cdot \left(\frac{N_{\tan cs}}{2} - 1 \right) + S_{cubeta} \cdot 2 = \frac{3}{2} \cdot 2,1m + 1,5m \cdot \left(\frac{3}{2} - 1 \right) + 1,5m \cdot 2 = 6,9m$$

on:

- $N_{\tan cs}$.- Nombre de tancs d'emmagatzematge.
- D .- Diàmetre dels tancs (m).
- $S_{\tan cs}$.- Separació entre els tancs (APQ) (1,5m)
- S_{cubeta} .- Separació fins la paret de la cubeta (APQ com a mínim 1 m) (1,5m)

○ **Amplada de la cubeta**

$$Amplada = 2 \cdot D + S_{\tan cs} + 2 \cdot S_{cubeta} = 2 \cdot 2,1m + 1,5m + 2 \cdot 1,5m = 8,7m$$

○ **Alçada de la cubeta.**

L'alçada de la cubeta no es pot calcular directament sinó que es necessiten altres variables per a poder arribar a saber el valor d'aquesta.

- Àrea ocupada pel tanc

$$A_{\tan cs} = \left(\frac{N_{\tan cs}}{2} \cdot D + \left(\frac{N_{\tan cs}}{2} - 1 \right) \cdot S_{\tan cs} \right) \cdot (S_{\tan cs} + 2 \cdot D) =$$

$$= \left(\frac{3}{2} \cdot 2,1m + \left(\frac{3}{2} - 1 \right) \cdot 1,5m \right) \cdot (1,5m + 2 \cdot 2,1m) = 22,23m^2$$

- Àrea lliure de la cubeta

$$A_{lliure\ cubeta} = (ll\ arg\ ada \cdot amplada) - A_{\tan cs} = (6,9m \cdot 8,7m) - 22,23m^2 = 37,8m^2$$

- Alçada de la paret interior de la cubeta.

$$H_{cubeta} = \frac{V_{cubeta}}{A_{lliure\ cubeta}} = \frac{20\text{m}^3}{37,8\text{m}^2} = 0,53\text{m}$$

on:

- V_{cubeta} . - volum del cubeta (m^3) = 20m^3
- H_{cubeta} . - Alçada de la paret exterior de la cubeta

Segons les APQs l'alçada mínima de la paret exterior és d'un metre, que és el valor escollit.

Finalment, les dimensions de la cubeta es poden veure a la *Taula 11.2*

Taula 11.2. Principals dimensions de la cubeta.

Paràmetres	Valors
Distància entre tancs (m)	1,5
Distància tancs-paret de la cubeta (m)	1,5
Llargada de la cubeta (m)	6,9
Amplada (m)	8,7
Alçada paret interior (m)	0,53
Alçada paret exterior (m)	1
Amplada paret (m)	0,6
Àrea ocupada pel tanc (m^2)	22,23
Àrea lliure del cubeta (m^2)	37,8
Capacitat cubeta (100% d'un tanc) (m^3)	20

11.1.2 Disseny dels tancs d'emmagatzematge de l'acètic anhidre

Es disposen dos tancs connectats entre sí; aquests tancs subministren l'acètic anhidre per la planta. El cabal que subministra el tanc és de 10,73 m³/dia. L'acètic anhidre que s'utilitza al procés es compra al proveïdor *Quimidroga* que està situat a la ciutat de Barcelona. El reactiu arriba per carretera en camions cisterna de 28,5 m³ cada dos dies.

Taula 11.3. Principals dimensions del tanc d'emmagatzematge d'acètic anhidre

Paràmetres	Valors
Diàmetre (m)	2,1
Alçada del tanc (m)	5,77
Alçada del líquid (m)	4,62
Volum ocupat (%)	80

El tanc d'emmagatzematge de l'acètic anhidre és de fons pla i capçal superior semiesfèric.

Per a fer el disseny mecànic de l'equip es necessiten saber algunes dades inicials:

Taula 11.4. Principals dades d'interès.

Paràmetres	Valors
Densitat (Kg/m ³)	1080
ΔP (atm)	0,48
Pressió de disseny (atm)	1,71
Temperatura de disseny (°C)	28,75

La variació de pressió (ΔP) de la taula anterior es refereix a la pressió exercida per l'alçada del líquid sobre el fons del tanc; aquests càlculs estan més detallats a l'apartat 11.1.1 *Disseny dels tancs d'emmagatzematge de fenol* del present manual de càlcul.

Taula 11.5. Gruixos de les diferents parts del tanc.

Gruixos	Valors
Part cilíndrica (mm)	4,04→6
Capçal superior semiesfèric (mm)	3,02→5
Capçal inferior pla (mm)	8

El material que es fa servir pel disseny del tanc és AISI316 i per a calcular els diferents gruixos es fa servir la normativa ASME. Bibliogràficament (Sinnott R.K., 1983) s'ha observat que el gruix mínim per la part cilíndrica d'un tanc d'aproximadament dos metres de diàmetre és de 6 mm. Pel capçal superior el gruix no és el mateix. La pressió que ha de suportar és molt més baixa i per tant s'aplica un gruix mínim de 5mm. Les variables que s'han fet servir per calcular el gruix són les mateixes que en el cas del tanc d'emmagatzematge de fenol: C_1 , C_2 , S (1367,55 atm) i E .

El que queda per saber és el pes que tindrà l'equip buit i ple. Per a obtenir aquesta dada s'utilitza la densitat del Carbon Steel que és 7850 Kg/m^3 . Es calcula el pes de l'equip buit i el fluid d'operació.

Taula 11.6. Pes de les diferents parts del tanc.

Paràmetres	Valors
Part cilíndrica (kg)	1799,4
Capçal superior (kg)	273,2
Capçal inferior (kg)	217,5
Pes total buit (kg)	2290,1
Pes total+fluid (kg)	19570,1

- **Aïllant tèrmic**

Els tancs d'emmagatzematge es trobaran a l'exterior i, per tant, es decideix instal·lar un aïllant tèrmic. D'aquesta manera es podrà assegurar la temperatura correcta a l'interior del recipient.

Les dimensions de la cubeta per a aquest parc de tancs d'emmagatzematge d'acètic anhidre han estat obtingudes seguint exactament el mateix procediment emprat pel disseny de la cubeta dels tancs de fenol.

Taula 11.7. Principals dimensions de la cubeta.

Paràmetres	Valors
Distància entre tancs (m)	1,5
Distància tancs-paret de la cubeta (m)	1,5
Llargada de la cubeta (m)	6,9
Amplada (m)	8,7
Alçada paret interior (m)	0,53
Alçada paret exterior (m)	1
Amplada paret (m)	0,6
Àrea ocupada pel tanc (m ²)	22,23
Àrea lliure del cubeta (m ²)	37,8
Capacitat cubeta (100% d'un tanc) (m ³)	20

11.1.3 Disseny dels tancs d'emmagatzematge d'àcid sulfúric al 67%.

Es disposen dos tancs connectats entre si; aquests tancs subministraran l'àcid sulfúric per la planta. El cabal que subministra el tanc d'emmagatzematge d'àcid sulfúric és de 4,05 m³/dia. El sulfúric que s'utilitza per la planta es compra al proveïdor *Rebain International* que està situat a Castelldefels (Barcelona); aquesta quantitat de reactiu arriba per carretera en camions cisterna de 12 m³ cada tres dies.

Les dimensions dels tancs són les següents:

Taula 11.8. Principals dimensions del tanc.

Paràmetres	Valors
Diàmetre (m)	1,7
Alçada del tanc (m)	4,41
Alçada del líquid (m)	3,52
Volum ocupat (%)	80

El tanc d'emmagatzematge de l'àcid sulfúric disposa d'un fons pla i capçal superior semiesfèric.

A la *Taula 11.9* es poden veure algunes dades d'interès de la mescla:

Taula 11.9. Principals dades d'interès.

Paràmetres	Valors
Densitat (Kg/m ³)	1536
ΔP (atm)	0,52
Pressió de disseny (atm)	1,75
Temperatura de disseny (°C)	28,75

La variació de pressió (ΔP) de la taula anterior és la pressió exercida per l'alçada del líquid sobre el fons del tanc; aquests càlculs es troben més detallats a l'apartat *11.1.1 Disseny dels tancs d'emmagatzematge de fenol* del present manual de càlcul.

Taula 11.10. Gruixos de les diferents parts del tanc.

Gruixos	Valors
Part cilíndrica (mm)	3,05→6
Capçal superior (mm)	2,68→5
Capçal inferior (mm)	8

El material que es fa servir al disseny del tanc és Hastelloy. Per calcular els diferents gruixos del tanc es fa servir la normativa ASME. A més d'aquesta normativa, també s'aplica el gruix mínim necessari en funció del diàmetre del recipient. Aquesta dada bibliogràfica (Sinnott R.K., 1983) contempla com a gruix mínim de 7 mm per a un tanc de entre 1 i 2 m de diàmetre. Aquesta xapa no s'empra i per tant s'escull un gruix de 6 mm. Les variables que utilitzades per a calcular el gruix són:

- C1: Marge de corrosió (2mm).
- C2: Marge de tolerància (1mm).
- S: Esforç del material (3198 atm).
- E: Radiografiat parcial (0,85).

Seguidament es calcula el pes del reactor. Per obtenir aquesta dada s'utilitza la densitat del Hastelloy que és 8220 Kg/m^3 . Es calcula el pes de l'equip buit i també el pes del fluid d'operació.

Taula 11.11. Pes de les diferents parts del tanc.

Paràmetres	Valors
Part cilíndrica (Kg)	1369,4
Capçal superior (Kg)	187,7
Capçal inferior (Kg)	149,3
Pes total buit (Kg)	1706,3
Pes total+fluid (Kg)	13944,3

La cubeta de retenció per a l'emmagatzematge d'aquest reactiu és indispensable. A la Taula 11.12 s'hi troben especificades les principals dimensions de la cubeta.

Taula 11.12. Principals dimensions de la cubeta.

Paràmetres	Valors
Distància entre tancs (m)	1,5
Distància tancs-paret de la cubeta (m)	1,5
Llargada de la cubeta (m)	4,7
Amplada (m)	7,9
Alçada paret interior (m)	0,35
Alçada paret exterior (m)	1
Amplada paret (m)	0,6
Àrea ocupada pel tanc (m^2)	8,33
Àrea lliure del cubeta (m^2)	28,8
Capacitat cubeta (100% d'un tanc) (m^3)	10

11.1.4 Disseny dels tancs d'emmagatzematge d'àcid nítric al 65%.

Es disposen dos tancs connectats entre si; aquests tancs subministren l'àcid nítric per a la planta. El cabal que subministra el tanc és de 8,61 m³/dia. El nítric que s'utilitza per la planta es compra al proveïdor *Rebain International* que està situat a Castelldefels (Barcelona). La quantitat de reactiu arriba per carretera en camions cisterna de 18 m³ cada dos dies.

Les dimensions dels tancs són les següents:

Taula 11.13. Dimensions del tanc d'emmagatzematge d'àcid nítric al 67%.

Paràmetres	Valors
Diàmetre (m)	1,9
Alçada del tanc (m)	5,29
Alçada del líquid (m)	4,23
Volum ocupat (%)	80

El capçal superior del tanc té forma semiesfèrica. Això facilita la recollida de vapors nitrosos quan el tanc es reompli amb àcid nítric fresc. A més, haurà de portar un venteig per a fer baixar la pressió en cas que aquesta augmenti massa degut a la formació de vapors. A la *Taula 11.14* s'esmenten algunes dades d'interès per a fer posteriorment el corresponent disseny de l'equip:

Taula 11.14. Principals dades d'interès de la mescla

Paràmetres	Valors
Densitat (Kg/m ³)	1335
ΔP (atm)	0,55
Pressió de disseny (atm)	1,77
Temperatura de disseny (°C)	28,75

La variació de pressió (ΔP) de la taula anterior és la diferència de pressió que provoca la columna de líquid a dintre del tanc d'emmagatzematge; aquests càlculs estan més detallats a l'apartat *11.1.1 Disseny dels tancs d'emmagatzematge de fenol* del present manual de càlcul.

El material que es fa servir al disseny del tanc és AISI304, amb els següents gruixos:

Taula 11.15. Gruixos de les diferents parts del tanc.

Gruixos	Valors
Part cilíndrica (mm)	3,69→6
Capçal superior (mm)	2,88→5
Fons inferior pla (mm)	8

Per a calcular els diferents gruixos del tanc es fa servir la normativa ASME però quan aquests gruixos es troben per sota dels mínims establerts, en funció del diàmetre del recipient, a la bibliografia (Sinnott R.K., 1983) s'aplicaran aquests últims. Les variables que es fan servir per a calcular el gruix són:

- C_1 : Marge de corrosió (1,5mm).
- C_2 : Marge de tolerància (1mm).
- S : Esforç del material (1671,45 atm).
- E : Radiografiat parcial (0,85).

Per últim, es calcula el pes del reactor. Per obtenir aquesta dada s'utilitza la densitat del AISI304 que és 7900 Kg/m³. Calculem el pes de l'equip buit i també amb el fluid d'operació.

Taula 11.16. Pes de les diferents parts del tanc.

Paràmetres	Valors
Part cilíndrica (Kg)	1501,6
Capçal superior (Kg)	225,2
Capçal inferior (Kg)	179,2
Pes total buit (Kg)	1905,9
Pes total+fluid (Kg)	17925,9

Per últim es dimensiona les dimensions de la cubeta de retenció que ha de tenir el tanc d'emmagatzematge de àcid nítric.

Taula 11.17. Principals dimensions de la cubeta.

Paràmetres	Valors
Distància entre tancs (m)	1,5
Distància tancs-paret de la cubeta (m)	1,5
Llargada de la cubeta (m)	4,9
Amplada (m)	8,3
Alçada paret interior (m)	0,49
Alçada paret exterior (m)	1
Amplada paret (m)	0,6
Àrea ocupada pel tanc (m ²)	10,07
Àrea lliure del cubeta (m ²)	30,6
Capacitat cubeta (100% d'un tanc) (m ³)	15

11.1.5 Disseny del tanc d'emmagatzematge n-pentà.

Es disposen d'un tanc d'emmagatzematge, aquest tanc subministra el pentà per la planta. El cabal que subministra el tanc és de 4,05 m³/dia. El pentà que s'utilitza per la planta es compra al proveïdor *Coralim Aditivos* que està situat a València, aquesta quantitat de reactiu arriba per carretera en camions cisterna de 12 m³.

Les dimensions dels tancs són les següents:

Taula 11.18. Principals dimensions del tanc.

Paràmetres	Valors
Diàmetre (m)	1,3
Alçada del tanc (m)	3,77
Alçada del líquid (m)	3,16
Volum ocupat (%)	84

El capçal superior del tanc d'emmagatzematge és semiesfèric per a facilitar l'acumulació de vapor orgànic que es forma com a conseqüència de l'equilibri vapor-líquid del dissolvent orgànic. A la taula següent es poden veure les dades d'interès de la mescla necessàries per a fer posteriorment els càlculs de disseny del tanc:

Taula 11.19. Principals dades d'interès.

Paràmetres	Valors
Densitat (Kg/m ³)	620,7
ΔP (atm)	0,19
Pressió de disseny (atm)	1,37
Temperatura de disseny (°C)	28,75

La variació de pressió a la que es refereix la taula anterior és aquella que provoca la columna de líquid al tanc; aquests càlculs estan més detallats a l'apartat 11.1.1 Disseny dels tancs d'emmagatzematge de fenol del present manual de càlcul.

Taula 11.20. Gruixos de les diferents parts del tanc.

Gruixos	Valors
Part cilíndrica (mm)	3,13→6
Capçal superior semiesfèric (mm)	2,76→5
Capçal inferior pla (mm)	8

El material que es fa servir al disseny del tanc és AISI-304. Per calcular els diferents gruixos del tanc es fa servir la normativa ASME, bibliogràficament s'ha observat que el gruix mínim d'un tanc de més d'1 m de diàmetre és de 7 mm, també s'ha observat que el gruix del capçal superior és com a mínim el gruix de la part cilíndrica. Les variables que s'ha fet servir per calcular el gruix són:

- C_1 : Marge de corrosió (1,5 mm).
- C_2 : Marge de tolerància (1 mm).
- S : Esforç del material (1772,75 atm).
- E : Radiografiat parcial (0,85).

Ara es calcula el pes del reactor. Per obtenir aquesta dada s'utilitza la densitat del AISI304 que és 7900 Kg/m³. Es calcula el pes de l'equip buit i també el pes quan contingui el fluid d'operació.

Taula 11.21. Pes de les diferents parts del tanc.

Paràmetres	Valors
Part cilíndrica (Kg)	732,6
Capçal superior (Kg)	105,7
Capçal inferior (Kg)	83,9
Pes total buit (Kg)	922,1
Pes total+fluid (Kg)	4025,6

- **Aïllant tèrmic**

Els tancs d'emmagatzematge es trobaran a l'exterior i, per tant, es decideix instal·lar un aïllant tèrmic. D'aquesta manera es podrà assegurar la temperatura correcta a l'interior del recipient.

11.1.6 Disseny dels tancs d'emmagatzematge d'àcid acètic glacial.

Es disposen dos tancs connectats entre si, aquests tancs subministraran l'àcid sulfúric per la planta. El cabal que subministra el tanc és de 10,57 m³/dia. El sulfúric que s'utilitza per la planta es compra al proveïdor Rebain International que està situat a Castelldefels (Barcelona), aquesta quantitat de reactiu arriba per carretera amb camions cisterna de 30 m³ cada tres dies.

Les dimensions dels tancs són les següents:

Taula 11.22. Principals dimensions del tanc.

Paràmetres	Valors
Diàmetre (m)	2,1
Alçada del tanc (m)	5,77
Alçada del líquid (m)	4,57
Volum ocupat (%)	80

Els capçals del tanc són plans degut a que es treballa a una temperatura de 25°C, llavors l'estat de l'àcid és líquid. A continuació s'esmenta diferents dades d'interès de la mescla:

Taula 11.23. Principals dades d'interès

Paràmetres	Valors
Densitat (Kg/m ³)	1048
ΔP (atm)	0,46
Pressió de disseny (atm)	1,68
Temperatura de disseny (°C)	28,75

La segona columna de la taula anterior és la pressió exercida per l'alçada del líquid al tanc, aquests càlculs estan més detallats a l'apartat 11.1.1 *Disseny dels tancs d'emmagatzematge de fenol* del present manual de càlcul.

El material que es fa servir al disseny del tanc és AISI-316, amb els següents gruixos:

Taula 11.24. Gruixos de les diferents parts del tanc.

Gruixos	Valors
Part cilíndrica (mm)	3,76→6
Capçal superior semiesfèric(mm)	2,9→5
Capçal inferior pla (mm)	8

Per calcular els diferents gruixos del tanc es fa servir la normativa ASME, bibliogràficament s'ha observat que el gruix mínim d'un tanc de 2,1m de diàmetre és de 6mm, pel capçal superior es tindrà 5mm de gruix perquè la xapa te que suportar menys pressió. Les variables que s'ha fet servir per calcular el gruix són:

- C1: Marge de corrosió (1,5mm).
- C2: Marge de tolerància (1mm).
- S: Esforç del material (1772,75 atm).
- E: Radiografiat parcial (0,85).

Ara es calcula el pes del reactor. Per obtenir aquesta dada s'utilitza la densitat del AISI316 que és 7980 Kg/m³. Es calcula el pes de l'equip buit i també amb el fluid d'operació.

Taula 11.25. Pes de les diferents parts del tanc.

Paràmetres	Valors
Part cilíndrica (Kg)	1829,2
Capçal superior (Kg)	277,7
Capçal inferior (Kg)	221,1
Pes total buit (Kg)	2328
Pes total+fluid (Kg)	18038,4

- **Aïllant tèrmic**

Els tancs d'emmagatzematge es trobaran a l'exterior i, per tant, es decideix instal·lar un aïllant tèrmic. D'aquesta manera es podrà assegurar la temperatura correcta a l'interior del recipient.

11.1.7 Disseny dels tancs d'emmagatzematge de l'hidròxid sòdic al 50%

Es disposen d'un tanc d'emmagatzematge; aquest tanc subministra l'hidròxid sòdic per la planta. El cabal que subministra el tanc és de 0,41 m³/dia. L'hidròxid sòdic que s'utilitza al procés es compra al proveïdor *Rebain international* que està situat en Castelldefels (Barcelona). El reactiu arriba per carretera en camions cisterna de 1,7 m³ cada tres dies.

Taula 11.26. Principals dimensions del tanc d'emmagatzematge

Paràmetres	Valors
Diàmetre (m)	1
Alçada del tanc (m)	2,55
Alçada del líquid (m)	2,1
Volum ocupat (%)	82,7

El tanc d'emmagatzematge de l'hidròxid sòdic és de fons pla i capçal superior semiesfèric.

Per a fer el disseny mecànic de l'equip es necessiten saber algunes dades inicials:

Taula 11.27. Principals dades d'interès.

Paràmetres	Valors
Densitat (Kg/m ³)	1045
ΔP (atm)	0,21
Pressió de disseny (atm)	1,39
Temperatura de disseny (°C)	28,75

La variació de pressió (ΔP) de la taula anterior es refereix a la pressió exercida per l'alçada del líquid sobre el fons del tanc; aquests càlculs estan més detallats a l'apartat 11.1.1 *Disseny dels tancs d'emmagatzematge de fenol* del present manual de càlcul.

Taula 11.28. Gruixos de les diferents parts del tanc.

Gruixos	Valors
Part cilíndrica (mm)	2,99→5
Capçal superior semiesfèric (mm)	2,70→4
Capçal inferior pla (mm)	8

El material que es fa servir pel disseny del tanc és AISI304 i per a calcular els diferents gruixos es fa servir la normativa ASME. Bibliogràficament (Sinnott R.K., 1983) s'ha observat que el gruix mínim per la part cilíndrica d'un tanc d'aproximadament d'un metre de diàmetre és de 5 mm. Pel capçal superior el gruix no és el mateix. La pressió que ha de suportar és molt més baixa i per tant s'aplica un gruix mínim de 4mm. Les variables que s'han fet servir per calcular el gruix són les mateixes que en el cas del tanc d'emmagatzematge de fenol: C_1 , C_2 , S (1671,45atm) i E .

El que queda per saber és el pes que tindrà l'equip buit i ple. Per a obtenir aquesta dada s'utilitza la densitat del l'acer al carboni que és 7950 Kg/m³. Es calcula el pes de l'equip buit i el fluid d'operació.

Taula 11.29. Pes de les diferents parts del tanc.

Paràmetres	Valors
Part cilíndrica (kg)	317,58
Capçal superior (kg)	50,04
Capçal inferior (kg)	49,64
Pes total buit (kg)	417,25
Pes total+fluid (kg)	2145,25

11.1.8 Disseny de sitges d'emmagatzematge de reactius sòlids

Les sitges són el lloc físic on s'emmagatzema el bisulfit sòdic i el nitrit sòdic. A continuació es fa el disseny detallat d'una de les sitges; en aquest cas serà la que emmagatzema el nitrit sòdic.

- **Disseny funcional de la sitja de nitrit sòdic**

Per a poder fer el càlcul de la grandària de l'equip és necessari conèixer la quantitat de reactiu que es necessita diàriament. En aquest cas es té un cabal màssic de 1,894 kg NaNO₂/min. A partir d'aquesta dada és dissenya l'equip per a que pugui emmagatzemar reactiu durant tres dies. Aquesta forma de disseny evitarà que la planta hagi de parar si hi ha qualsevol problema amb el transport del reactiu. El volum que ha de tenir la sitja d'emmagatzematge de nitrit sòdic és el següent:

$$1,894 \frac{\text{Kg}}{\text{min}} \cdot \frac{60 \text{ min}}{1 \text{ hora}} \cdot \frac{24 \text{ hores}}{1 \text{ dia}} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{2170 \text{ Kg}} \cdot 4,5 \text{ dies} = 6,79 \text{ m}^3$$

S'ha decidit que es porti a la planta el nitrit sòdic en cisternes de 6 m³ cada 4 dies, l'encarregada de portar el nitrit sòdic és l'empresa *Rebain International S.L* de Castelldefels (Barcelona).

Un cop s'ha especificat com i d'on vindrà el reactiu a la planta, s'ha d'especificar quina forma geomètrica tindrà la sitja. Aquest equip disposa d'un capçal superior semiesfèric, una part central cilíndrica i per últim un capçal de forma cònica amb una sortida per on es portarà el reactiu a un tanc de dissolució.

A continuació es calcula el volum de les diferents parts de l'equip.

Taula 11.30. Principals dimensions de la sitja.

Parts de la sitja	Valors
Volum de la part cilíndrica (80%) (m ³)	5,43
Volum de la part Cònica (20%) (m ³)	1,36
Volum total (m ³)	6,79
Volum de la sitja (m ³)	8
Percentatge del sòlid	84,83%

Un cop s'ha decidit el percentatge i el volum que tenen les diferents parts de l'equip ja es pot realitzar el dimensionament d'aquest; primer de tot es calcula el diàmetre i l'alçada de la part cilíndrica de la sitja. A continuació es dissenya la resta de la sitja, és a dir, els capçals superior i inferior.

○ **Disseny de la part cilíndrica.**

Per a dissenyar la part cilíndrica es decideix fixar un diàmetre i a partir d'aquest es calcula l'alçada tot comprovant que el valor que se n'obtingui sigui lògic. Això és degut a que es busca una relació H/D aproximadament de 3.

$$D = 1,8m$$

$$H_{cil} = \frac{V \cdot 4}{\pi \cdot D^2} = \frac{7m^3 \cdot 4}{\pi \cdot (1,8m)^2} = 3,14m$$

$$\frac{H_{total}}{D} = \frac{5,56m}{1,8m} = 3,02$$

○ **Disseny de la part cònica.**

De la part cònica es coneix el diàmetre superior, degut a que és el mateix que el diàmetre de la part cilíndrica; a més es fixa el diàmetre inferior de la sitja que, en aquest cas, té un valor de 20 cm. A partir d'aquests dos paràmetres es pot dimensionar la part cònica.

$$H_{con} = \frac{3 \cdot V_{con}}{\pi \cdot [r^2 + r \cdot R + R^2]} = \frac{3 \cdot 1,36m^3}{\pi \cdot ((0,05m)^2 + 0,05m \cdot 0,9m + (0,9m)^2)} = 1,51m$$

On:

- r .- Radi menor del con
- R .- Radi major del con

$$H_{total} = H_{cil} + H_{con} + H_{capçal} = 3,14 m + 1,51 m + 0,9 m = 5,56 m$$

- **Disseny mecànic.**

El disseny mecànic de la sitja es pot realitzar a partir de les dades que es proporcionen a la *Taula 11.31*.

Taula 11.31. Principals dades de disseny.

Paràmetres	Valors
Material de construcció	AISI316
ΔP (degut a l'alçada del sòlid)	0,77 atm
Pressió de disseny	2 atm
Temperatura de operació	20 °C
Temperatura de disseny	40°C

○ **Càlcul dels gruixos de l'equip**

Per calcular el gruix de l'equip se separa l'equip en tres parts: cilíndrica, cònica i per últim el capçal superior de forma semiesfèrica. Les dades comuns a tots tres dissenys han estat les següents:

- R.- radi intern (800mm)
- S.- límit elàstic (1772,75 atm)
- C1.- tolerància a la corrosió (1,5mm)
- C2.- tolerància a la fabricació (1mm)

Taula 11.32. Gruixos i paràmetres de la part cilíndrica.

Paràmetres	Valors
Pressió interior (atm)	2,03
t (gruix teòric en mm)	1,50
t final (mm)	5

Taula 11.33. Gruixos i paràmetres de la part cònica.

Paràmetres	Valors
Pressió (atm)	2,03
t (gruix teòric en mm)	2,50
t final (mm)	6
Angle (α)	20°

Taula 11.34. Gruixos i paràmetres del capçal superior.

Paràmetres	Valors
Pressió superior (atm)	1,15
t (gruix teòric en mm)	2,5
t final (mm)	4

○ **Càlcul del pes de l'equip.**

Per a realitzar els càlculs i trobar el pes de l'equip es realitza el mateix procediment que s'ha realitzat anteriorment; això vol dir que separa l'equip en tres parts: cilíndrica, cònica i semiesfèrica.

- Càlcul del pes del cilindre.

$$P_{es} = \frac{\pi}{4} \cdot H \cdot \left((D + 2 \cdot t)^2 - D^2 \right) \cdot \rho_{AISI\ 316} = \frac{\pi}{4} \cdot 3,48m \cdot \left((1,6m + 2 \cdot 0,005m)^2 - (1,6m)^2 \right) \cdot 7980 \frac{Kg}{m^3} = 704,2Kg$$

- Càlcul del pes del capçal superior.

$$P_{es} = \frac{\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot \left((r + t)^3 - r^3 \right) \cdot \rho_{AISI\ 316}}{2} = 161,5Kg$$

- Càlcul del pes de la part cònica.

Per trobar el pes de la part cònica (251,3kg), s'ha calculat el volum del con amb el gruix i s'ha restat el volum del con sense el gruix. L'equació que s'ha fet servir és la que anteriorment s'ha realitzat per calcular l'alçada del con.

Llavors el pes total de tota la sitja és:

$$P_{esT} = P_{es\ cil} + P_{es\ con} + P_{es\ capçal} = 704,2Kg + 161,5Kg + 251,3Kg = 1117Kg$$

Si a més es calcula el pes de la sitja en operació s'obté el següent resultat:

$$P_{es\ operació} = P_T + V \cdot \rho = 1117Kg + 6,79m^3 \cdot 2170 \frac{Kg}{m^3} = 15844,78Kg$$

- **Disseny de la sitja del bisulfit sòdic**

A continuació és pot observar les taules amb les dades principals del disseny de la sitja del bisulfit sòdic, si es vol veure més detallat aquests càlculs s'ha d'observar el disseny de la sitja de nitrit sòdic. El bisulfit sòdic vindrà per carretera amb bidons de l'empresa Rebain International de Castelldefels (Barcelona). A continuació és calcula el numero de bidons que fan falta.

$$1,7m^3 \cdot \frac{1bidó}{0,1m^3} = 17bidons$$

Aquest nombre de bidons és la quantitat de bidons necessaris en dues setmanes. Un cop se sap la manera de transport i la procedència dels bidons, s'haurà de dimensionar la sitja:

Paràmetres	Valors
Diàmetre part cilíndrica (m)	1,1
Alçada part cilíndrica (m)	1,18
Volum part cilíndrica (m ³)	1,27
Diàmetre inferior part cònica (m)	0,2
Alçada part cònica (m)	0,87
Volum part cònica (m ³)	0,33
Volum capçal superior (m ³)	0,4

Per últim es poden observar el pes i el gruixos de l'equip

Paràmetres	Valors
Gruix del capçal superior (mm)	4
Gruix de la part cilíndrica (mm)	5
Gruix de la part cònica (mm)	6
Pes del capçal superior (Kg)	60,5
Pes de la part cilíndrica (Kg)	288,58
Pes de la part cònica (Kg)	70,81

11.2 DISSENY DE REACTORS

11.2.1 Disseny del reactor de formació d'òxids de nitrogen (R-302)

- **Disseny funcional del reactor**

Per a determinar el volum d'aquest reactor es tenen en compte les pèrdues d'òxids de nitrogen que es produeixen al reactor de nitració i el temps de residència de la reacció entre l'àcid sulfúric (70%) procedent del tanc T-301 i el nitrit sòdic (40%) procedent del tanc T-105. Aquestes pèrdues representen un 10% de la quantitat d'òxids de nitrogen que s'empren diàriament a la planta. Així, de forma estequiomètrica i per retrocés, partint d'aquest 10% d'òxids que es perden, es realitza el càlcul dels volums necessaris de les dissolucions de reactius:

- Volum de la dissolució de nitrit sòdic (40%):

$$39,53 \frac{\text{kmol NO}_x}{\text{dia}} \cdot \frac{1 \text{ kmol NaNO}_2}{1 \text{ kmol NO}_x} \cdot \frac{69 \text{ kg NaNO}_2}{1 \text{ kmol NaNO}_2} \cdot \frac{100 \text{ kg dó.}}{40 \text{ kg NaNO}_2} \cdot \frac{m^3}{1480 \text{ kg dó.}} = \frac{5,33 \text{ m}^3 \text{ dó.}}{\text{dia}}$$

- Volum de la dissolució de sulfúric (70% aprox.):

$$39,53 \frac{\text{kmol NO}_x}{\text{dia}} \cdot \frac{1 \text{ kmol NaNO}_2}{1 \text{ kmol NO}_x} \cdot \frac{1 \text{ kmol H}_2\text{SO}_4}{1 \text{ kmol NaNO}_2} \cdot \frac{98 \text{ kg H}_2\text{SO}_4}{1 \text{ kmol H}_2\text{SO}_4} \cdot \frac{100 \text{ kg dó.}}{70,58 \text{ kg H}_2\text{SO}_4} \cdot \frac{m^3}{1592,87 \text{ kg dó.}} = \frac{3,72 \text{ m}^3 \text{ dó.}}{\text{dia}}$$

La suma d'aquests cabals (Q_{entrada}) és la que s'empra per a calcular la capacitat del reactor ja que durant la reacció es dona la formació d'aigua però també es desprenen els òxids de nitrogen que es van formant. A més, el temps de reacció és de 40 minuts però es pren un temps de residència (τ) de 50 minuts per a fer el càlcul del volum del reactor. Aquest sobredimensionament s'utilitza per a poder absorbir possibles variacions de necessitats d'òxids de nitrogen a la planta. Així, el volum final del líquid al reactor que se n'obté és el següent:

$$V_{\text{líquid}} = Q_{\text{entrada}} \cdot \tau = \frac{9,05 \text{ m}^3}{\text{dia}} \cdot \frac{1 \text{ dia}}{1440 \text{ min}} \cdot 50 \text{ min} = 0,32 \text{ m}^3$$

Com que el reactor es dissenya amb fons i capçal torisfèrics la relació alçada/diàmetre que es fa servir inicialment es calcula amb l'alçada i volum de líquid que hi hauria d'haver aproximadament al reactor un cop estigués en operació. Es decideix aplicar una relació alçada de líquid/diàmetre de 1,2.

$$H_{\text{liquid}} = 1,2 \cdot D_{\text{reactor}}$$

$$V_{\text{liquid}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{reactor}}^2 \cdot H_{\text{liquid}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{reactor}}^2 \cdot 1,2 \cdot D_{\text{reactor}} = \frac{1,2 \cdot \pi}{4} \cdot D_{\text{reactor}}^3$$

$$D_{\text{reactor}} = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot V_{\text{liquid}}}{1,2 \cdot \pi}} = 0,7 \text{ m} \quad H_{\text{liquid}} = 1,2 \cdot D_{\text{reactor}} = 0,84 \text{ m}$$

on:

- H_{liquid} .- alçada aproximada de líquid a dintre del reactor, m
- D_{reactor} .- diàmetre del reactor, m
- V_{liquid} .- volum de líquid a dintre del reactor, m³

Per a sobredimensionar la mida del recipient (20%) es recalcula l'alçada de líquid real que hi haurà a dintre del reactor. Aquest càlcul té en compte que el fons torisfèric allotja una part del volum de líquid total del reactor ($V_{\text{torisfèric}}$). Sabent aquest volum de líquid que es trobarà a dintre del capçal, es pot saber el volum ($V_{\text{liquid cilindre}}$) i l'alçada de líquid ($H_{\text{liquid cilindre}}$) reals que hi hauran a la part cilíndrica del recipient. A continuació es representen les dimensions obtingudes:

$$V_{\text{liquid}} = V_{\text{liquid cilindre}} + V_{\text{torisfèric}} = V_{\text{liquid cilindre}} + 0,0809 \cdot D_{\text{reactor}}^3 = 0,32 \text{ m}^3$$

$$V_{\text{liquid cilindre}} = V_{\text{liquid}} - V_{\text{torisfèric}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{reactor}}^2 \cdot H_{\text{liquid cilindre}}$$

$$H_{\text{TOTAL líquid}} = H_{\text{liquid cilindre}} + H_{\text{torisfèric}} = \frac{V_{\text{liquid cilindre}}}{\frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{reactor}}^2} + H_{\text{torisfèric}} = 0,89 \text{ m}$$

$$H_{\text{Re actor}} = 1,2 \cdot H_{\text{liquid cilindre}} + 2 \cdot H_{\text{torisfèric}} = 1,26 \text{ m}$$

on:

- H_{reactor} - alçada total del reactor, m
- $H_{\text{TOTAL líquid}}$ - nivell de líquid al reactor, m

- **Balanç d'energia del reactor**

Per a realitzar el disseny del bescanvi de calor, es tenen en compte diverses variables com per exemple l'àrea disponible de bescanvi, l'àrea necessària de bescanvi, el tipus de fluid refrigerant, el cabal volumètric, el salt tèrmic,...etc.

La camisa d'aquest reactor ha de ser capaç d'eliminar la calor que produeix la reacció tenint en compte que també influeix la temperatura a la que entren els reactius. La reacció entre el nitrit sòdic i l'àcid sulfúric és exotèrmica i, per tant, per a treballar sota condicions isotèrmiques s'ha de realitzar un balanç entàlpic per a la reacció.

$$\sum n_{j,\text{entrada}} \cdot C_{pm,j} \cdot (T_2 - T_{1,j}) - \frac{n_k}{v_k} X_k \cdot \Delta H = q = -11,16 \text{ kJ / s}$$

$$\sum n_{j,\text{entrada}} \cdot C_{pm,j} \cdot (T_2 - T_{1,j}) =$$

$$= n_{\text{sulfúric,entrada}} \cdot C_{pm \text{ sulfúric}(70\%)} \cdot (35 - 25) + n_{\text{NaNO}_2,\text{entrada}} \cdot C_{pm \text{ NaNO}_2(40\%)} \cdot (35 - 20) = 4,39 \text{ kJ / s}$$

$$- \frac{n_k}{v_k} X_k \cdot \Delta H = - \frac{n_{\text{sulfúric}}}{-2} \cdot [\Delta H_{f,\text{productes}} - \Delta H_{f,\text{reactius}}] = 15,55 \text{ kJ / s}$$

on:

- $n_{j,\text{entrada}}$ - cabal molar de les dissolucions d'entrada al reactor, kmol/s
- $C_{pm,j}$ - calor específic de la mescla per a cada dissolució d'entrada al reactor, kJ/kmol K
- T_2 - temperatura de reacció (35 °C)
- T_1 - temperatura d'entrada de les dissolucions, °C
- n_k - cabal molar del reactiu limitant, kmol/s
- X_k - grau de conversió
- ΔH - variació d'entalpia de la reacció (-68000 kJ/kmol)
- $\Delta H_{f,\text{productes}}, \Delta H_{f,\text{reactius}}$ - variació d'entalpies de formació de productes i reactius, kJ/kmol

El calor calculat amb el balanç energètic s'extreu amb una camisa a través de la qual circula aigua a una temperatura d'entrada de 10°C. En aquest cas no hi ha problemes de disposició d'àrea per a operar isotèrmicament. La calor que desprèn la reacció és tan petita que la superfície del reactor (sobredimensionada un 20%) no suposa cap problema.

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{ml} \rightarrow A = \frac{q}{U \cdot \Delta T_{ml}} = \frac{-11,16 \frac{\text{kJ}}{\text{s}}}{0,4 \frac{\text{kJ}}{\text{sm}^2 \cdot ^\circ\text{C}} \cdot 13,98^\circ\text{C}} \cdot 1,2 = 2,4 \text{ m}^2$$

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T_2 - T_{f,entrada}) - (T_2 - T_{f,sortida})}{\ln \frac{(T_2 - T_{f,entrada})}{(T_2 - T_{f,sortida})}} = 13,98^\circ\text{C}$$

on:

- Q - calor que ha d'eliminar el fluid bescanviador (-11,16 kJ/s)
- U - coeficient global de transferència de calor (0,4 kJ/sm²°C)
- ΔT_{ml} - variació de temperatura mitjana logarítmica, °C
- $T_{f,entrada}$ - temperatura del fluid refrigerant a l'entrada, °C
- $T_{f,sortida}$ - temperatura del fluid refrigerant a la sortida, °C

A més de la calor que s'ha d'extreure del sistema i de l'àrea necessària per a fer-ho, es necessita saber el cabal màssic i volumètric de refrigerant que passarà per la camisa per tal d'assegurar que funcioni correctament.

$$Q = m_{\text{refrigerant}} \cdot C_{p,\text{refrigerant}} \cdot (T_{f,sortida} - T_{f,entrada}) \rightarrow m_{\text{refrigerant}} = \frac{Q}{C_{p,\text{refrigerant}} \cdot (T_{f,sortida} - T_{f,entrada})}$$

$$m_{\text{refrigerant}} = 74,4 \text{ mol/s} \cdot \frac{18 \text{ kg}}{1000 \text{ mol}} = 1,34 \text{ kg/s}$$

on:

- $C_{p,\text{refrigerant}}$ - capacitat específica del fluid refrigerant (0,075 kJ/molK)
- $m_{\text{refrigerant}}$ - cabal de refrigerant (74,4 mol/s ó 1,34 kg/s)

- **Disseny mecànic del reactor**

El disseny funcional del reactor va seguit del disseny mecànic del mateix. Aquest últim té com a objectiu garantir la seguretat física d'operació mitjançant l'ajust de formes i gruixos de totes les parts de l'equip. Aquest disseny es realitza seguint la normativa ASME, tot i que, per a establir els gruixos mínims de cilindres i capçals, s'aplicaran els valors de la següent figura (Sinnott R.K.,1983) on ja es troben inclosos 2 mm de tolerància a la corrosió:

Vessel diameter (m)	Minimum thickness (mm)
1	5
1 to 2	7
2 to 2.5	9
2.5 to 3.0	10
3.0 to 3.5	12

Figura 11.1. Gruixos mínims per a parets cilíndriques en funció del diàmetre

El gruix del reactor es calcula en base a la pressió interna degut a que es treballa a pressió atmosfèrica.

- **Cos cilíndric**

L'equació que s'aplica per a calcular el gruix del cos del reactor ($t_{cilindre}$) per pressió interna és la següent:

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

on:

- P .- pressió de disseny, atm
- R .- radi intern del cilindre, mm
- E .- factor de soldadura
- S .- límit elàstic del material de construcció, atm
- C_1 .- tolerància a la corrosió, mm
- C_2 .- tolerància a la fabricació, mm

El primer que es mira a l'hora d'aplicar l'equació és la pressió de disseny. Aquesta serà el producte d'un sobredimensionament (30%) de la pressió a la que es vol normalment operar:

$$P \text{ (atm)} = \left(P_{op} + \rho g H_l \cdot \frac{1}{101325 \frac{N}{m^2}} \right) \cdot 1,3 = 2,75 \text{ atm}$$

on:

- P_{op} .- pressió d'operació (2atm)
- g .- gravetat ($9,81 m/s^2$)
- H_l .- alçada de la columna de líquid (1 m)
- ρ .- densitat de la mescla de reacció ($1514,8 \text{ kg/m}^3$)

La temperatura a la que es treballa també es té en compte ja que el límit elàstic dels materials depenen d'aquesta. El sobredimensionament que es fa és del 15%. Així, el límit elàstic que s'empra ha de poder suportar una temperatura de $40,2^\circ\text{C}$. Per a escollir el valor d'aquest límit es fa servir la següent taula (Sinnott, 1983):

Material	Tensile strength (N/mm ²)	Design stress at temperature °C (N/mm ²)									
		0 to 50	100	150	200	250	300	350	400	450	500
Carbon steel (semi-killed or silicon killed)	360	135	125	115	105	95	85	80	70		
Carbon-manganese steel (semi-killed or silicon killed)	460	180	170	150	140	130	115	105	100		
Carbon-molybdenum steel, 0.5 per cent Mo	450	180	170	145	140	130	120	110	110		
Low alloy steel (Ni, Cr, Mo, V)	550	240	240	240	240	240	235	230	220	190	170
Stainless steel 18Cr/8Ni unstabilised (304)	510	165	145	130	115	110	105	100	100	95	90
Stainless steel 18Cr/8Ni Ti stabilised (321)	540	165	150	140	135	130	130	125	120	120	115
Stainless steel 18Cr/8Ni Mo $2\frac{1}{2}$ per cent (316)	520	175	150	135	120	115	110	105	105	100	95

Figura 11.2. Límits elàstics per a diferents materials en funció de la temperatura

En aquest cas es fan servir dos materials diferents. El primer d'ells, l'acer al carboni, es fa servir com a material de suport i resistència mecànica; el segon, tefló, es fa servir per al recobriment superficial de l'interior del reactor. Aquest últim material té la capacitat de suportar la presència dels òxids de nitrogen fins a temperatures de 400F (204°C).

El límit elàstic de l'acer al carboni per a una temperatura de 40°C aproximadament pren un valor de 135 N/mm^2 (1350 atm).

Pel que fa el factor de soldadura, s'escull un valor de 0,85. Aquest correspon a una soldadura amb radiografiat parcial. La tolerància a la corrosió que s'aplica és de 1,5 mm perquè tenim components de sortida (RCTA) i per tant una solució de NaHSO_4 amb aigua. La tolerància a la fabricació és de 1 mm.

Amb tot aquest conjunt de dades ja es pot aplicar l'equació inicial per a obtenir el gruix del cos del reactor. El resultat que se n'obté de fer els càlculs és de 3,25 mm. Com que el reactor fa menys d'un metre de diàmetre s'escull un gruix mínim de 5mm segons la Figura 11.1 de gruixos mínims en funció del diàmetre del recipient.

- **Capçals torisfèrics**

Els capçals torisfèrics tenen la següent forma:

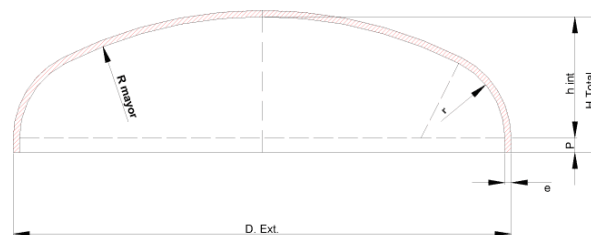


Figura 11.3. Forma d'un capçal torisfèric

A la figura apareix una lletra r que és la mida del radi del torus i una lletra R que és el radi de l'esfera que uneix els torus dels extrems (L a l'equació del gruix). Per a determinar el gruix d'aquest tipus de capçal es fa servir la següent equació de la normativa ASME:

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

on:

- *P*.- pressió de disseny, atm
- *L*.- diàmetre de l'esfera que uneix els torus = diàmetre del cilindre (698,98 mm)
- *E*.- factor de soldadura (0,85)
- *S*.- límit elàstic del material de construcció (1350 atm)
- *C*₁.- tolerància a la corrosió, mm
- *C*₂.- tolerància a la fabricació, mm

Aquesta equació s'aplica per a relacions de *r/L* de 0,6 . Tots els valors coincideixen amb aquells que s'han fet servir per a calcular el gruix del cos cilíndric excepte la *P*. Aquesta pressió de disseny varia degut a que hi ha dos capçals i tots dos suporten una pressió diferent a la del cos del reactor. En el cas del capçal superior, la pressió de disseny és la pressió de operació sobredimensionada en un 30%, és a dir, 2,6 atm. Pel que fa al capçal inferior, la pressió de disseny és aquella que ha de suportar el cilindre més la pressió de la columna de líquid que conté el capçal torisfèric, és a dir, 2,77 atm.

Aplicant l'equació del gruix per capçals torisfèrics s'obtenen els següents gruixos:

$$t_{\text{capçal superior}} = \frac{0,885 \cdot 2,6 \text{ atm} \cdot 698,98 \text{ mm}}{1350 \cdot 0,85 - 0,1 \cdot 2,6} + C_1 + C_2 = 3,7 \text{ mm} \rightarrow 4 \text{ mm}$$

$$t_{\text{capçal inferior}} = \frac{0,885 \cdot 2,77 \text{ atm} \cdot 698,98 \text{ mm}}{1350 \cdot 0,85 - 0,1 \cdot 2,77 \text{ atm}} + C_1 + C_2 = 3,8 \text{ mm} \rightarrow 5 \text{ mm}$$

El gruix del capçal superior s'arrodoneix a un gruix de 4mm però el gruix del capçal inferior ha de ser com a mínim igual o superior a aquell que s'utilitza pel cos del recipient, és a dir, 5mm.

○ **Càlcul del pes del reactor**

El pes de qualsevol recipient es calcula sempre de la mateixa manera. Primerament, mitjançant els gruixos de cadascuna de les parts del reactor, es calcula el volum de material que es fa servir. Posteriorment es multiplica aquest volum per la densitat del material del que anirà construït l'equip.

- Pes d'acer del cilindre ($Pes_{acer\ cilindre}$)

$$Pes_{acer\ cilindre} = \frac{\pi}{4} \cdot \left[\left(D_{reactor} + \frac{2 \cdot t_{cilindre}}{1000} \right)^2 - D_{reactor}^2 \right] \cdot H_{cilindre} \cdot \rho_{acer\ al\ carboni} = 87,4kg$$

- Pes d'acer dels capçals

$$Pes_{acer\ capçal} = \left(V_{torisfèric\ exterior} - V_{torisfèric\ interior} \right) \cdot \rho_{acer\ al\ carboni}$$

$$Pes_{acer\ capçal} = \left(0,0809 \cdot D_{torisfèric\ exterior}^3 - 0,0809 \cdot D_{reactor}^3 \right) \cdot \rho_{acer\ al\ carboni}$$

$$D_{torisfèric\ exterior}^3 = \left(D_{reactor} + 2 \cdot t_{capçal} \right)^3$$

on:

- $V_{torisfèric} = 0,0809 \cdot D_{torisfèric}^3$ (segons bibliografia Perry, 1999)
- $D_{torisfèric\ interior} = D_{reactor}$
- $\rho_{acer\ al\ carboni} = 7850\ kg/m^3$

En aquest cas el $D_{torisfèric\ exterior}$ serà diferent per a un capçal i per l'altre, tenint en compte que el superior fa 4mm de gruix i l'inferior 5mm. El pes de tots dos capçals és de 17 kg.

- Pes de l'equip

El pes total de l'equip buit és aquell que s'obté de sumar el pes de totes les parts de l'equip, és a dir, cos i capçals. Aquest pren un valor de 106,3 kg d'acer al carboni.

$$\text{“Pes de l'equip buit} = \text{pes del cilindre} + \text{pes del capçal superior} + \text{pes del capçal inferior”}$$

Quan l'equip està ple, s'ha d'afegir al pes de l'equip buit aquell pes que prové del producte entre el volum de líquid que hi a dintre del reactor i la seva densitat

$$\text{“Pes de l'equip ple} = \text{pes de l'equip buit} + V_{\text{equip}} \cdot \rho_{\text{fluid en operació}}”$$

El pes de l'equip ple ha de considerar la densitat de l'aigua si el fluid que ha de contenir té una densitat inferior a aquesta. Això és degut a que a la posta en marxa s'utilitzarà aigua per a fer la comprovació de les estanqueïtats dels equips. Com que aquest no és el cas, el pes es calcula amb la densitat del fluid en operació. El pes final, amb el reactor ple, és de 775 kg acer.

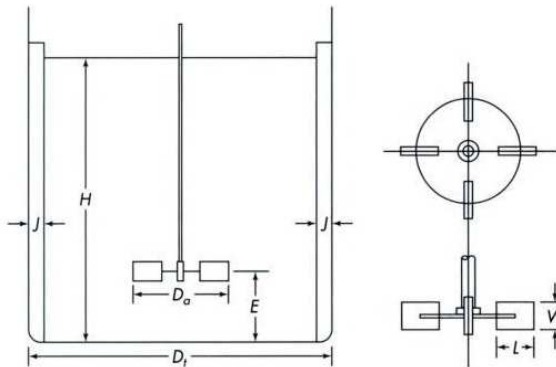
- **Disseny de l'agitador**

Quan es fa el disseny de l'agitador s'ha de tenir clar quin és l'objectiu d'aquest. En el cas del reactor de formació d'òxids de nitrogen el que es vol aconseguir és que hi hagi una bona mescla dels reactius i que amb la transferència de calor de la camisa no es presentin gradients de temperatura.

L'agitador que s'escull, per tal de dur a terme aquesta operació el més eficientment possible, és una turbina de disc amb sis pales. Aquestes turbines estan indicades per a mescles amb viscositat moderada i per a la dispersió de gasos.

○ **Dimensionament de l'agitador**

L'agitador es dimensiona segons un disseny estàndard de turbina. Així, per norma general, el reactor tindrà 4 bafles per a evitar que es formi un vòrtex al líquid que l'únic que provocaria és un empitjorament de la operació del reactor. A banda d'això, el dimensionament es fa segons la següent pauta (McCabe, 2001):



$$D_a = 1/2 \cdot D_{\text{reactor}} = 0,349 \text{ m}$$

$$J = 1/12 \cdot D_{\text{reactor}} = 0,058 \text{ m}$$

$$W = 0,2 \cdot D_a = 0,070 \text{ m}$$

$$L = 0,25 \cdot D_a = 0,087 \text{ m}$$

$$E = 1/6 \cdot D_{\text{reactor}} = 0,116 \text{ m}$$

○ **Càlcul de la potència de l'agitador**

La potència de l'agitador es calcula d'una forma o altra en funció de si el flux que es necessita és turbulent o laminar. En aquest cas, si es calcula el Reynolds s'obté un flux molt turbulent:

$$\text{Re} = \frac{D_a^2 \cdot N \cdot \rho}{\mu} = 2,6 \cdot 10^5$$

on:

- D_a .- diàmetre de la turbina (0,349 m)
- N .- revolucions per segon de la turbina (1 rps)
- ρ .- densitat de la mescla (1514 kg/m^3)
- μ .- viscositat ($7,2 \cdot 10^{-4} \text{ kg/m}\cdot\text{s}$)

Amb aquesta dada de Reynolds es pot buscar el número de potència (N_p), que serà imprescindible per a fer el càlcul de la potència que necessitarà la turbina per a complir amb les especificacions que es necessiten pel reactor. El número de potència també està en funció del tipus de turbina. Aquesta dada s'extreu del gràfic representat a la Figura 11.4:

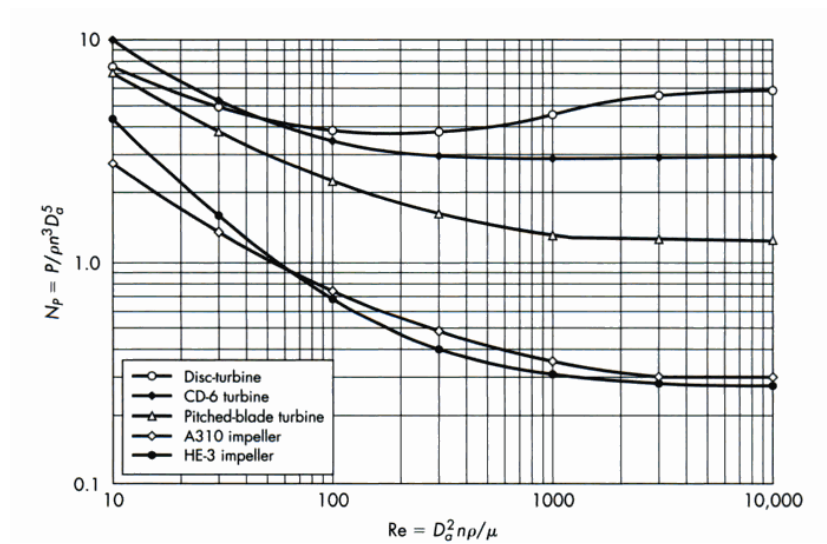


Figura 11.4. Número de potència en funció del nombre Reynolds

El N_p per a un $Re > 1 \cdot 10^5$ i una turbina de disc amb sis pales és de 6. Ara es determina la potència (P) mitjançant la següent equació:

$$P = N_p \cdot D_a^5 \cdot n^3 \cdot \rho = 39 \text{ W}$$

L'agitador necessitarà aportar 39 watts a $0,32 \text{ m}^3$ de mescla. Això vol dir que es té una relació de $121,9 \text{ W/m}^3$. Aquesta relació serveix per a analitzar qualitativament l'agitació del recipient. A la *Figura 11.5* es pot comprovar que els requeriments de potència per a unes condicions d'agitació suaus o per a una bona transferència de calor es compleixen amb l'agitador i la velocitat d'agitació escollides.

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

Figura 11.5. Requeriments energètics per a tancs agitats i amb bafles

- **Dissolució de NaNO₂ al 40%**

Aquest tanc de dissolució és necessari per a poder afegir al reactor de formació d'òxids de nitrogen el nitrit sòdic al 40% totalment dissolt. Inicialment, per a fer el disseny d'aquest tanc, es consideren 20 minuts de temps de dissolució per a tenir disponibilitat suficient d'aquesta dissolució sempre que es necessitin òxids de nitrogen. Una manera de comprovar si amb aquest temps de residència hi ha prou com per a mantenir tot el sòlid dissolt, és aplicar la següent equació:

$$Np^{\frac{1}{3}} \cdot Re = \frac{5,2}{Fo} \rightarrow \left[\frac{P}{d^5 N^3 \rho} \right]^{\frac{1}{3}} \cdot \left[\frac{d^2 N \rho}{\mu} \right] = \frac{5,2}{\left(\frac{\rho D^2}{\mu \theta} \right)}$$

on:

- *Np*.- nombre de potència
- *Re*.- nombre de Reynolds
- *Fo*.- nombre de Fourier
- *P*.- potència de l'agitador, *W*
- *d*.- diàmetre de l'agitador, *m*
- *N*.- velocitat de l'agitador, *rps*
- *ρ*.- densitat del fluid, *kg/m³*
- *μ*.- viscositat del fluid, *kg/ms*
- *D*.- diàmetre del tanc, *m*
- *τ*.- temps de mescla, *s*

Un cop desenvolupada l'equació s'arriba al següent temps de mescla:

$$\theta = \frac{5,2 \cdot D^2 \cdot \rho^{\frac{1}{3}}}{P^{\frac{1}{3}}} = \frac{5,2 \cdot (0,43)^2 (1480)^{\frac{1}{3}}}{6,3^{\frac{1}{3}}} = 5,93s$$

El que es comprova amb aquest resultat és que el temps de mescla és menyspreable en comparació amb el temps de residència del tanc, per tant, la mescla entre el sòlid i el líquid estarà sempre totalment homogeneïtzada

11.2.2 Disseny del reactor de formació d'àcid nítrós (HNO₂) (R-301)

El reactor de formació de l'àcid nítrós s'utilitza per a preparar el medi de reacció del reactor de nitració. El reactor consta de dues entrades; una primera entrada és de solució de sulfúric al 70% provinent del tanc de dilució T-301. La segona entrada és d'òxids de nitrogen procedents del tanc d'emmagatzematge T-302.

Per a fer la determinació del volum necessari del reactor s'utilitza el temps de residència desitjat, que en aquest cas és de 25 minuts, i el cabal de sortida dels productes tot comprovant que sigui superior als cabals d'entrada de reactius:

$$V_{líquid} = Q_{líquid} \cdot \tau$$

$$V_{líquid} = 0,261 \frac{m^3}{min} \cdot 25 \text{ min} = 6,53 m^3$$

Aquest reactor es dissenya amb fons i capçal torisfèrics per a treballar millor amb els gasos. La relació alçada/diàmetre aplicada per a fer el disseny de l'equip és de 2,5. El líquid no ocuparà el capçal inferior torisfèric sinó que estarà recolzat sobre una placa plana amb una part de la seva àrea perforada per a permetre la introducció dels òxids de nitrogen a través d'aquesta. Finalment, les dimensions de l'equip queden de la següent forma:

$$H_{\text{liquid}} = 2,5 \cdot D_{\text{reactor}}$$

$$V_{\text{liquid}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{reactor}}^2 \cdot H_{\text{liquid}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{reactor}}^2 \cdot 2,5 \cdot D_{\text{reactor}} = \frac{\pi}{4} \cdot 2,5 \cdot D_{\text{reactor}}^3$$

$$D_{\text{reactor}} = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot V_{\text{liquid}}}{2,5 \cdot \pi}} = 1,49 \text{ m} \quad H_{\text{liquid}} = 2,5 \cdot D_{\text{reactor}} = 3,73 \text{ m}$$

on:

- H_{liquid} .- alçada de líquid a dintre del reactor, m
- D_{reactor} .- diàmetre del reactor, m
- V_{liquid} .- volum de líquid a dintre del reactor, m³

S'aplica un sobredimensionament d'un 15% i es pren el volum resultant com el volum del cilindre comptant, per tant, el volum del capçal torisfèric ($V_{\text{torisfèric}}$) a banda. El sobredimensionament final és del 25% del volum de líquid. A continuació es presenten les dimensions obtingudes:

Taula 11.35. Dimensions del reactor de formació d'àcid nítrós

Paràmetre	Valor
Alçada del cos cilíndric (m)	4,80
Diàmetre (m)	1,49
Volum del capçal torisfèric (m ³)	0,27
Volum final del reactor (m ³)	8,94
Alçada final del reactor (m)	5,34

- **Balanç d'energia del reactor**

Per a realitzar el balanç energètic del reactor es tenen en compte, principalment, l'entalpia de la reacció i la temperatura i cabals d'entrada dels reactius. Les condicions de d'operació també són importants. El reactor treballa a 10°C i 5atm de forma que s'aconsegueix que la reacció es trobi desplaçada cap als productes líquids i per tant els gasos reaccionin favorablement.

El bescanvi de calor del reactor es realitza a través d'un serpentí per on circula aigua glicolada al 40% de propilenglicol. La reacció de formació de l'àcid nítrós és endotèrmica i, per tant, per a treballar sota condicions isotèrmiques s'ha de realitzar un balanç entàlpic per a la reacció.

$$\sum n_{j,entrada} \cdot C_{pm,j} \cdot (T_2 - T_{1,j}) - \frac{n_k}{v_k} X_k \cdot \Delta H = q = -202,5 \text{ kJ / s}$$

$$\sum n_{j,entrada} \cdot C_{pm,j} \cdot (T_2 - T_{1,j}) =$$

$$n_{\text{sulfúric,entrada}} \cdot C_{pm \text{ sulfúric}(70\%)} \cdot (10 - 25) + n_{NO_x,entrada} \cdot C_{pm NO_x} \cdot (10 - 70) = -210,25 \text{ kJ / s}$$

$$-\frac{n_k}{v_k} X_k \cdot \Delta H = -\frac{n_{NO_x}}{-1} \cdot [\Delta H_{f,productes} - \Delta H_{f,reactius}] = 7,78 \text{ kJ / s}$$

on:

- $n_{j,entrada}$.- cabal molar de les dissolucions d'entrada al reactor, kmol/s
- $C_{pm,j}$.- calor específic de la mescla per a cada dissolució d'entrada al reactor, kJ/kmol K
- T_2 .- temperatura de reacció (10 °C)
- T_1 .- temperatura d'entrada de les dissolucions, °C
- n_k .- cabal molar del reactiu limitant, (0,0023 kmol/s)
- X_k .- grau de conversió
- ΔH .- variació d'entalpia de la reacció (3400 kJ/kmol)
- $\Delta H_{f, productes}$, $\Delta H_{f, reactius}$.- variació d'entalpies de formació de productes i reactius, kJ/kmol

Aquesta situació de refrigeració quan la reacció és endotèrmica és deguda a la baixa temperatura a la que s'ha de treballar i a la temperatura d'entrada dels reactius que està més de 10°C per sobre de la temperatura a la qual es dona la reacció. L'aigua glicolada entra al serpentí a -10°C i prové de la reacció de nitració. Aquí s'aprofita el refrigerant que surt d'una altra operació amb bescanvi de calor. Per a saber l'àrea necessària de bescanvi (amb un 20% de sobredimensionament) es realitzen els següents càlculs:

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{ml} \rightarrow A = \frac{q}{U \cdot \Delta T_{ml}} = \frac{-202,48 \frac{\text{kJ}}{\text{s}}}{0,7 \frac{\text{kJ}}{\text{sm}^2 \cdot ^\circ\text{C}} \cdot 19^\circ\text{C}} = 18,3 \text{ m}^2$$

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T_2 - T_{f, entrada}) - (T_2 - T_{f, sortida})}{\ln \frac{(T_2 - T_{f, entrada})}{(T_2 - T_{f, sortida})}} = 19^\circ\text{C}$$

on:

- Q .- calor que ha d'eliminar el fluid bescanviador (-202,48 kJ/s)
- U .- coeficient global de transferència de calor (0,7 kJ/sm²°C)
- ΔT_{ml} .- variació de temperatura mitjana logarítmica, °C
- $T_{f, entrada}$.- temperatura del fluid refrigerant a l'entrada (-10 °C)
- $T_{f, sortida}$.- temperatura del fluid refrigerant a la sortida (-8°C)

A més de la calor que s'ha d'extreure del sistema i de l'àrea necessària per a fer-ho, es necessita saber el cabal màssic i volumètric de refrigerant que passarà pel serpentí per tal d'assegurar que funcioni correctament.

$$Q = m_{\text{refrigerant}} \cdot C_{p, \text{refrigerant}} \cdot (T_{f, sortida} - T_{f, entrada})$$

$$m_{\text{refrigerant}} = \frac{Q}{C_{p, \text{refrigerant}} \cdot (T_{f, sortida} - T_{f, entrada})}$$

$$m_{\text{refrigerant}} = 762,7 \text{ mol} / \text{s} \cdot \frac{18 \text{ kg}}{1000 \text{ mol}} = 27 \text{ kg} / \text{s}$$

on:

- $C_{p, \text{refrigerant}}$.- capacitat específica del fluid refrigerant (0,139 kJ/molK)
- $m_{\text{refrigerant}}$.- cabal de refrigerant (27 kg/s)

Finalment es detallen els resultats del disseny del serpentí a la *Taula 11.36*:

Taula 11.36. *Dimensions del serpentí*

Àrea de bescanvi (m²)	18,286
Velocitat típica (m/min)	72
Àrea de secció (m²)	0,023
Radi (m)	0,085
Diàmetre (m)	0,169
Longitud del tub (m)	34,4
Longitud/volta (m)	4,062
n^o voltes del serpentí	8,463
Distància entre volta-volta (m)	0,169
Alçada final del serpentí (m)	2,866

- **Disseny mecànic del reactor**

El disseny funcional del reactor va seguit del disseny mecànic del mateix. Aquest últim té com a objectiu garantir la seguretat física d'operació mitjançant l'ajust de formes i gruixos de totes les parts de l'equip. Aquest disseny es realitza seguint la normativa ASME, tot i que, per a establir els gruixos mínims de cilindres i capçals, s'aplicaran els valors de la bibliografia (Sinnott R.K., 1983) on ja es troben inclosos 2 mm de tolerància a la corrosió.

El gruix del reactor es calcula en base a la pressió interna degut a que es treballa externament a pressió atmosfèrica.

- **Cos cilíndric**

L'equació que s'aplica per a calcular el gruix del cos del reactor ($t_{cilindre}$) per pressió interna és la següent:

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

on:

- P .- pressió de disseny (5 atm+30%)
- R .- radi intern del cilindre (746,5 mm)
- E .- factor de soldadura (0,85)
- S .- límit elàstic del material de construcció ($S_{\text{Acer al carboni teflonat}} = 1350 \text{ atm}$)
- C_1 .- tolerància a la corrosió (1,5 mm)
- C_2 .- tolerància a la fabricació (1 mm)

El primer que es mira a l'hora d'aplicar l'equació és la pressió de disseny. Aquesta serà el producte d'un sobredimensionament (30%) de la pressió a la que es vol normalment operar:

$$P \text{ (atm)} = \left(P_{op} + \rho g H_l \cdot \frac{1}{101325 \frac{N}{m^2}} \right) \cdot 1,3 = 7,37 \text{ atm}$$

on:

- P_{op} .- pressió d'operació (5atm)
- g .- gravetat ($9,81 \text{ m/s}^2$)
- H_l .- alçada de la columna de líquid al cilindre (3,73 m)
- ρ .- densitat de la mescla de reacció (1855 kg/m^3)

La temperatura a la que es treballa també es té en compte ja que el límit elàstic dels materials depenen d'aquesta. El sobredimensionament que es fa és del 15%. Així, el límit elàstic que s'empra ha de poder suportar una temperatura de 11,5°C.

En aquest cas es fan servir dos materials diferents. El primer d'ells, l'acer al carboni, es fa servir com a material de suport i resistència mecànica; el segon, tefló, es fa servir per al recobriments superficial de l'interior del reactor. Aquest últim material té la capacitat de suportar la presència dels òxids de nitrogen i de sulfúric fins a temperatures de 350F (177°C).

El límit elàstic de l'acer al carboni per a una temperatura de 10°C aproximadament pren un valor de 135 N/mm^2 (1350 atm).

Pel que fa el factor de soldadura, s'escull un valor de 0,85. Aquest correspon a una soldadura amb radiografiat parcial. La tolerància a la corrosió que s'aplica és de 2 mm perquè el medi és fortament àcid. La tolerància a la fabricació és de 1 mm.

Amb tot aquest conjunt de dades ja es pot aplicar l'equació inicial per a obtenir el gruix del cos del reactor. El resultat que se n'obté de fer els càlculs mitjançant la normativa ASME és de 7,8 mm (8mm). Com que segons la bibliografia (Sinnott R.K., 1983) aquest gruix per a un recipient de 1 a 2m de diàmetre hauria de ser de 7mm com a mínim, el gruix final escollit és el que s'ha obtingut amb la normativa ASME, és a dir, 8mm.

o **Capçals torisfèrics**

El gruix d'un capçal torisfèric es pot obtenir a partir de la següent fórmula:

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

on:

- *P.- pressió de disseny (5atm)*
- *L.- diàmetre de l'esfera que uneix els torus = diàmetre del cilindre (1493 mm)*
- *E.- factor de soldadura (0,85)*
- *S.- límit elàstic del material de construcció (1350 atm)*
- *C₁.- tolerància a la corrosió (2mm)*
- *C₂.- tolerància a la fabricació (1mm)*

Aquesta equació s'aplica per a relacions de r/L de 0,6 . Tots els valors coincideixen amb aquells que s'han fet servir per a calcular el gruix del cos cilíndric excepte la P. Aquesta pressió de disseny varia degut a que hi ha dos capçals i tots dos suporten una pressió diferent a la del cos del reactor. En el cas del capçal superior, la pressió de disseny és la pressió de operació sobredimensionada en un 30%, és a dir, 6,5atm. Pel que fa al capçal inferior, la pressió de disseny és aquella que ha de superar la columna de líquid del cilindre més la pressió a la part superior del reactor, és a dir, 7,37atm.

Aplicant l'equació del gruix per capçals torisfèrics s'obtenen els següents gruixos:

$$t_{\text{capçal superior}} = \frac{0,885 \cdot 6,5 \text{ atm} \cdot 1493 \text{ mm}}{1350 \cdot 0,85 - 0,1 \cdot 6,5} + C_1 + C_2 = 10,5 \text{ mm} \rightarrow 11 \text{ mm}$$

$$t_{\text{capçal inferior}} = \frac{0,885 \cdot 7,37 \text{ atm} \cdot 1493 \text{ mm}}{1350 \cdot 0,85 - 0,1 \cdot 7,37 \text{ atm}} + C_1 + C_2 = 11,5 \text{ mm} \rightarrow 12 \text{ mm}$$

○ **Càlcul del pes del reactor**

El pes de qualsevol recipient es calcula sempre de la mateixa manera. Primerament, mitjançant els gruixos de cadascuna de les parts del reactor, es calcula el volum de material que es fa servir. Posteriorment es multiplica aquest volum per la densitat del material del que anirà construït l'equip.

- Pes d'acer del cilindre ($Pes_{\text{acer cilindre}}$)

$$Pes_{\text{acer cilindre}} = \frac{\pi}{4} \cdot \left[\left(D_{\text{reactor}} + \frac{2 \cdot t_{\text{cilindre}}}{1000} \right)^2 - D_{\text{reactor}}^2 \right] \cdot H_{\text{cilindre}} \cdot \rho_{\text{acer al carboni}} = 1421,7 \text{ kg}$$

- Pes d'acer dels capçals

$$Pes_{\text{acer capçal}} = \left(V_{\text{torisfèric exterior}} - V_{\text{torisfèric interior}} \right) \cdot \rho_{\text{acer al carboni}}$$

$$Pes_{\text{acer capçal}} = \left(0,0809 \cdot D_{\text{torisfèric exterior}}^3 - 0,0809 \cdot D_{\text{reactor}}^3 \right) \cdot \rho_{\text{acer al carboni}}$$

$$D_{\text{torisfèric exterior}}^3 = \left(D_{\text{reactor}} + 2 \cdot t_{\text{capçal}} \right)^3$$

on:

- $V_{torisfèric} = 0,0809 \cdot D_{torisfèric}^3$ (segons bibliografia Perry, 1999)
- $D_{torisfèric interior} = D_{reactor}$
- $\rho_{acer al carboni} = 7850 \text{ kg/m}^3$

En aquest cas el $D_{torisfèric exterior}$ serà diferent per a un capçal i per l'altre, tenint en compte que el superior fa 11mm de gruix i l'inferior 12mm. El pes de tots dos capçals és de 198,4kg.

- Pes de l'equip

El pes total de l'equip buit és aquell que s'obté de sumar el pes de totes les parts de l'equip, és a dir, cos i capçals. Aquest pren un valor de 1620,1 kg d'acer al carboni.

“Pes de l'equip buit = pes del cilindre + pes del capçal superior + pes del capçal inferior”

Quan l'equip està ple, s'ha d'afegir al pes de l'equip buit aquell pes que prové del producte entre el volum de líquid que hi a dintre del reactor i la seva densitat

“Pes de l'equip ple = pes de l'equip buit + $V_{equip} \cdot \rho_{fluid en operació}$ ”

El pes de l'equip ple ha de considerar la densitat de l'aigua si el fluid que ha de contenir té una densitat inferior a aquesta. Això és degut a que a la posta en marxa s'utilitzarà aigua per a fer la comprovació de les estanqueïtats dels equips. Com que aquest no és el cas, el pes es calcula amb la densitat del fluid en operació. El pes final, amb el reactor ple, és de 13741kg acer.

11.2.3 Disseny del reactor de nitració (R-401/402/403)

- **Especificacions del reactor**

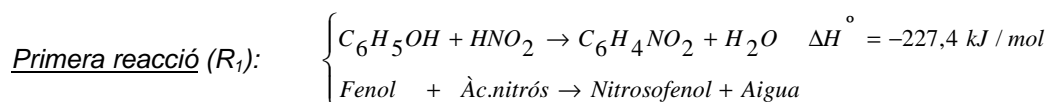
La reacció de nitració es realitza en tres reactors tipus batch seqüencialitzats en sèrie. Cada 40 minuts comença una nova reacció que té una durada total de 2 hores (càrrega+reacció+descàrrega+neteja). Primerament, després d'omplir el reactor amb el medi de reacció, que està compostat per àcid sulfúric i àcid nítrós procedents del reactor R-301, es comença l'addició del reactiu principal, el fenol (procedent dels tancs d'emmagatzematge T101/2/3). Amb aquesta addició es dona una reacció exotèrmica que necessitarà un sistema de bescanvi de calor (serpentí) per a treballar de forma isoterma a 10°C. Quan la primera reacció es finalitza comença l'addició d'àcid nítric. Aquesta segona etapa és endotèrmica, amb la qual cosa s'haurà d'aportar calor (camisa) per a treballar de forma isoterma a 25°C.

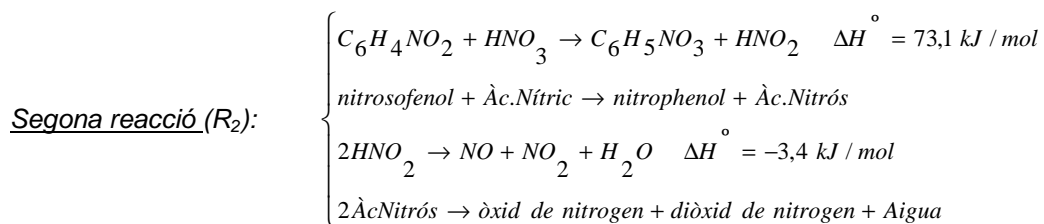
Per a poder realitzar tots els càlculs de relacions molars d'entrada de reactius, cabals màssics, entalpies de la reacció,...etc. s'ha buscat una patent mitjançant la qual s'obtingués el producte d'interès, és a dir, el para-nitrofenol, amb la millor qualitat i condicions de reacció possibles. El número de patent és el US Patent 5414148 i les relacions molars (kmol reactiu/kmol fenol) que ofereix aquesta patent són les següents:

Taula 11.37. Relacions molars de reactius purs a l'entrada del reactor de nitració

Reactius purs	Relació molar
Àcid Sulfúric	20,33
Àcid nítric	1,12
Àcid nítrós	2,10

Aquestes relacions molars no són suficients sinó que també s'han de fixar els kg de fenol/dia (17760 kg fenol/dia) i el número de batch/dia (36 batch/dia) necessaris per a arribar a una producció anual de paracetamol de 6000 tones. A continuació es poden veure les reaccions que hi tenen lloc i la seva estequiometria. A més, a la Taula 11.38 s'especifiquen les condicions que ha de complir el reactor de nitració, des de els mols de cada reactiu necessaris fins als temps d'addició, temperatures i temps de reacció.





Aquesta segona reacció s'ha escrit desglossada però realment es considera com una sola reacció perquè, encara que succeeixi en sèrie, la descomposició de l'àcid nitrós a 25°C i 1atm és tan ràpida que la limitació real té la procedència en el temps d'addició de l'àcid nítric.

Taula 11.38. Especificacions de les reaccions de nitració

Dades inicials			
<i>kg fenol/batch</i>			493,3
<i>Nº de batch/dia</i>			36
<i>t_{batch} (h)</i>			2
Rendiments molars de reacció			
Rendiment de para-nitrofenol (%)			92
Rendiment de 2,4-dinitrofenol (%)			0,93
Rendiment d'orto-nitrofenol (%)			0,60
Rendiment de By-products			6,47
Condicions de R₁		Condicions de R₂	
t _{primera reacció} (min)	40	t _{segona reacció} (min)	25
Temperatura (°C)	10	Temperatura (°C)	25
Pressió (atm)	5	Pressió (atm)	1
Àcid sulfúric (kmol H ₂ SO ₄ /batch)	106,57	Àcid nítric (kmol HNO ₃ /batch)	5,86
Àcid nitrós (kmol HNO ₂ /batch)	10,98		
Fenol (kmol/batch)	5,24		

Els rendiments de la *Taula 11.38* es refereixen a la relació entre la quantitat de mols de producte que s'han format i els mols de fenol totals que s'han convertit (*per aquesta patent el rendiment del fenol és del 100%*).

Amb tot aquest seguit de dades es fa el càlcul de la quantitat de líquid màxima que hi haurà al reactor durant tot el procés que en aquest cas és de $11,47\text{m}^3$. Aquest volum ha de ser igual al volum del reactor sense sobredimensionar, per tant, d'aquí ja es pot treure el diàmetre:

$$H_{\text{liquid}} = D_{\text{reactor}}$$

$$V_{\text{liquid}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{reactor}}^2 \cdot H_{\text{liquid}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{reactor}}^2 \cdot D_{\text{reactor}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{reactor}}^3$$

$$D_{\text{reactor}} = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot V_{\text{liquid}}}{\pi}} = 2,44 \text{ m}$$

on:

- H_{liquid} .- alçada de líquid a la part cilíndrica sense comptar amb el serpentí, m
- D_{reactor} .- diàmetre del reactor, m
- V_{liquid} .- volum de líquid a dintre del reactor ($11,47 \text{ m}^3$)

Fins aquí el diàmetre i el volum del reactor són les úniques dades que es poden saber. Fins que no es faci el disseny del serpentí no se sabrà l'alçada real de líquid a dintre del reactor ja que el 15% del reactor és cònic (fons) i l'alçada final de líquid que ocupa la part cilíndrica es veurà incrementada pel volum desplaçat pel serpentí

- **Balanç d'energia del reactor**
 - **Balanç d'energia de la primera reacció (R_1)**

Per a realitzar el disseny del bescanvi de calor, es tenen en compte diverses variables com per exemple l'àrea disponible de bescanvi, l'àrea necessària de bescanvi, el tipus de fluid refrigerant, el cabal volumètric, el salt tèrmic,...etc.

Com ja s'ha explicat a l'apartat anterior, aquest reactor disposa d'un serpentí, com el que es pot veure a la *Figura 11.6*, totalment submergit al líquid i d'una camisa.

Per a fer el balanç energètic de la primera reacció es tenen en compte les temperatures d'entrada dels reactius i també l'entalpia i el grau de conversió de la reacció. A continuació es pot veure la quantitat de calor que s'ha d'eliminar amb el serpentí:

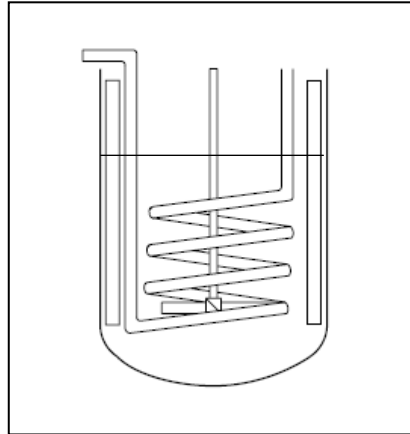


Figura 11.6.- Bescanvi de calor amb serpentí

$$\sum n_{j,entrada} \cdot C_{pm,j} \cdot (T_2 - T_{1,j}) - \frac{n_k}{v_k} X_k \cdot \Delta H = q = -513,9 \text{ kJ / s}$$

$$\sum n_{j,entrada} \cdot C_{pm,j} \cdot (T_2 - T_{1,j}) = -41430,4 \text{ kJ}$$

$$-\frac{n_k}{v_k} X_k \cdot \Delta H = -\frac{n_{fenol}}{-1} \cdot \left[\Delta H_{f,productes} - \Delta H_{f,reactius} \right] = -1191947 \text{ kJ}$$

on:

- $n_{j,entrada}$.- cabal molar de les dissolucions d'entrada al reactor
($n_{sulfúric,entrada} = 300,1 \text{ kmol de sulfúric al } 70\%$; $n_{fenol,entrada} = 12,1 \text{ kmol de fenol al } 80\%$)
- C_{pmj} .- calor específic de la mescla per a cada dissolució d'entrada al reactor, kJ/kmol K
- T_2 .- temperatura de reacció ($10 \text{ }^\circ\text{C}$)
- T_1 .- temperatura d'entrada de les dissolucions ($T_{sulfúric} = 10^\circ\text{C}$; $T_{fenol} < 50^\circ\text{C}$)
- n_k .- cabal molar del reactiu limitant, kmol fenol
- X_k .- grau de conversió
- ΔH .- variació d'entalpia de la reacció (-227380 kJ/kmol)
- $\Delta H_{f, productes}$, $\Delta H_{f, reactius}$.- variació d'entalpies de formació de productes i reactius, kJ/kmol

El calor obtingut de -513,9 kJ/s és el calor total de la reacció entre 40 minuts de temps de reacció. El serpentí portarà aigua glicolada a -15°C per tal de bescanviar tot aquest calor. L'àrea de bescanvi obtinguda amb un sobredimensionament del 20% és la següent:

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{ml} \rightarrow A = \frac{Q}{U \cdot \Delta T_{ml}} = \frac{-513,9 \frac{\text{kJ}}{\text{s}}}{0,7 \frac{\text{kJ}}{\text{sm}^2 \cdot ^\circ\text{C}} \cdot 22,4^\circ\text{C}} \cdot 1,2 = 39,3 \text{ m}^2$$

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T_2 - T_{f, entrada}) - (T_2 - T_{f, sortida})}{\ln \frac{(T_2 - T_{f, entrada})}{(T_2 - T_{f, sortida})}} = 22,4^\circ\text{C}$$

on:

- Q .- calor que ha d'eliminar el fluid bescanviador (-513,9 kJ/s)
- U .- coeficient global de transferència de calor (0,7 kJ/sm²°C)
- ΔT_{ml} .- variació de temperatura mitjana logarítmica, °C
- $T_{f, entrada}$.- temperatura del fluid refrigerant a l'entrada (-15 °C)
- $T_{f, sortida}$.- temperatura del fluid refrigerant a la sortida (-10°C)

A més de la calor que s'ha d'extreure del sistema i de l'àrea necessària per a fer-ho, es necessita saber el cabal màssic i volumètric de refrigerant que passarà per la camisa per tal de assegurar que funcioni correctament.

$$Q = m_{\text{refrigerant}} \cdot C_{p, \text{refrigerant}} \cdot (T_{f, sortida} - T_{f, entrada})$$

$$m_{\text{refrigerant}} = \frac{Q}{C_{p, \text{refrigerant}} \cdot (T_{f, sortida} - T_{f, entrada})} = 774,3 \text{ mol} / \text{s} \cdot \frac{18 \text{ kg}}{1000 \text{ mol}} = 27,4 \text{ kg} / \text{s}$$

on:

- $C_{p, \text{refrigerant}}$.- capacitat específica del fluid refrigerant (0,133 kJ/molK)
- $m_{\text{refrigerant}}$.- cabal de refrigerant (mol/s ó kg/s)

Les dimensions del serpentí es detallen a la *Taula 11.39*:

Taula 11.39. Dimensions del serpentí

Àrea de bescanvi (m ²)	39,32
Velocitat típica (m/min)	72
Àrea de secció (m ²)	0,02
radi (m)	0,08
Diàmetre (m)	0,17
Longitud del tub (m)	73,89
Longitud/volta (m)	7,05
nº voltes del serpentí	10,48
Distància entre volta-volta (m)	0,05
Alçada final del serpentí (m)	2,30

○ **Balanç d'energia de la segona reacció (R₂)**

El balanç energètic de la segona reacció es fa de la mateixa manera que el balanç de la primera reacció amb la diferència que no solsament s'ha d'escalfar tota la mescla del reactor fins a 25°C, sinó que també s'ha d'aportar calor degut a que la reacció és endotèrmica.

$$\sum n_{j,entrada} \cdot C_{pm,j} \cdot (T_2 - T_{1,j}) - \frac{n_k}{v_k} X_k \cdot \Delta H = q = 557,7 \text{ kJ / s}$$

$$\sum n_{j,entrada} \cdot C_{pm,j} \cdot (T_2 - T_{1,j}) = 472008,1 \text{ kJ}$$

$$-\frac{n_k}{v_k} X_k \cdot \Delta H = -\frac{n_{níttric}}{-1} \cdot [\Delta H_{f,productes} - \Delta H_{f,reactius}] = 364606 \text{ kJ}$$

on:

- $n_{j,entrada}$.- cabal molar de les dissolucions d'entrada al reactor, kmol
- $C_{pm,j}$.- calor específic de la mescla per a cada dissolució d'entrada al reactor, kJ/kmol K
- T_2 .- temperatura de reacció (25 °C)
- T_1 .- temperatura d'entrada de les dissolucions ($T_{mescla}=10^\circ\text{C}$; $T_{níttric}=20^\circ\text{C}$)
- n_k .- cabal molar del reactiu limitant (5,86 kmol nítric)
- X_k .- grau de conversió
- ΔH .- variació d'entalpia de la reacció ($\Delta H_{R1}=73114 \text{ kJ/kmol}$; $\Delta H_{R2}=-3400 \text{ kJ/kmol}$)
- $\Delta H_{f,productes}$, $\Delta H_{f,reactius}$.- variació d'entalpies de formació de productes i reactius, kJ/kmol

El calor obtingut de 557,7kJ/s és el calor total de la reacció entre 25 minuts de temps de reacció. Aquest s'ha de poder bescanviar a través de l'àrea disponible del reactor. L'àrea lateral disponible del reactor és de 23,7m² comptant amb l'àrea de la part cònica. La camisa, per tant, no ha de tenir un àrea que superi aquesta disponible.

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T \rightarrow A = \frac{q}{U \cdot \Delta T} = \frac{557,7 \frac{\text{kJ}}{\text{s}}}{0,4 \frac{\text{kJ}}{\text{sm}^2 \cdot ^\circ\text{C}} \cdot 95,4^\circ\text{C}} \cdot 1,2 = 17,5 \text{ m}^2$$

$$\Delta T = T_{\text{reacció}} - T_{\text{vapor}} = 95,4^\circ\text{C}$$

on:

- Q .- calor que ha d'eliminar el fluid bescanviador (557,5 kJ/s)
- U .- coeficient global de transferència de calor (0,4 kJ/sm²°C)
- ΔT_{ml} .- variació de temperatura mitjana logarítmica, °C
- $T_{f,entrada}$.- temperatura del fluid bescanviador a l'entrada (120,4 °C)
- $T_{f,sortida}$.- temperatura del fluid bescanviador a la sortida (120,4°C)

A més de la calor que s'ha d'aportar al sistema i de l'àrea necessària per a fer-ho, es necessita saber el cabal màssic i volumètric de vapor que passarà per la camisa per tal de assegurar que funcioni correctament.

$$Q = m_{\text{vapor}} \cdot \lambda_{\text{vapor}} \rightarrow m_{\text{vapor}} = 0,27 \text{ kg} / \text{s} = 14,04 \text{ m}^3 / \text{min}$$

on:

- λ_{vapor} .- calor latent del vapor (37,8kJ/molK)
- m_{vapor} .- cabal de vapor a través de la camisa (mol/s ó kg/s)

- **Disseny funcional del reactor**

Un cop s'ha fet el balanç energètic i se sap l'alçada que ocupa el serpentí, ja es pot fer el dimensionament de l'equip. L'alçada de líquid que hi hagi a la part cilíndrica ha de ser com a mínim igual a l'alçada del serpentí per a que no hi hagi part del tub sense mullar. Amb aquesta alçada i considerant que el 15% de l'alçada total de líquid correspon a l'alçada de la part inferior cònica es poden fer tots els càlculs:

$$H_{\text{líquid cilindre}} = H_{\text{serpentí}} + 0,4 = 2,69 \text{ m}$$

$$H_{\text{fons cònic}} = 0,15 \cdot H_{\text{líquid cilindre}} = 0,35 \text{ m}$$

$$H_{\text{cilindre}} = 1,15 \cdot H_{\text{líquid cilindre}} = 3,16$$

on:

- $H_{\text{líquid del cilindre}}$.- alçada de líquid a la part cilíndrica considerant el serpentí i 20cm de marge de líquid per sobre i per sota d'aquest, m
- $H_{\text{fons cònic}}$.- alçada del capçal inferior cònic (és el 15% de l'alçada de líquid al cilindre), m
- H_{cilindre} .- alçada final del cos cilíndric amb sobredimensionament del 15% sobre l'alçada de líquid del cilindre.

- **Disseny mecànic del reactor**

El disseny funcional del reactor va seguir del disseny mecànic del mateix. Aquest últim té com a objectiu garantir la seguretat física d'operació mitjançant l'ajust de formes i gruixos de totes les parts de l'equip. Aquest disseny es realitza seguint la normativa ASME, tot i que, per a establir els gruixos mínims de cilindres i capçals, s'aplicaran els valors de la bibliografia (Sinnott R.K.,1983) on ja es troben inclosos 2 mm de tolerància a la corrosió:

El gruix del reactor es calcula en base a la pressió interna degut a que, externament, es treballa a pressió atmosfèrica.

- **Cos cilíndric**

L'equació que s'aplica per a calcular el gruix del cos del reactor ($t_{cilindre}$) per pressió interna és la següent:

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

on:

- P .- pressió de disseny, atm
- R .- radi intern del cilindre, mm
- E .- factor de soldadura
- S .- límit elàstic del material de construcció, atm
- C_1 .- tolerància a la corrosió, mm
- C_2 .- tolerància a la fabricació, mm

El primer que es mira a l'hora d'aplicar l'equació és la pressió de disseny. Aquesta serà el producte d'un sobredimensionament (30%) de la pressió a la que es vol normalment operar:

$$P \text{ (atm)} = \left(P_{op} + \rho g H_l \cdot \frac{1}{101325 \frac{N}{m^2}} \right) \cdot 1,3 = 7 \text{ atm}$$

on:

- P_{op} .- pressió d'operació (5atm)
- g .- gravetat ($9,81 m/s^2$)
- H_l .- alçada de la columna de líquid (2,7 m)
- ρ .- densitat de la mescla de reacció ($1596 kg/m^3$)

La temperatura a la que es treballa també es té en compte ja que el límit elàstic dels materials depenen d'aquesta. El sobredimensionament que es fa és del 15%. Així, el límit elàstic que s'empra ha de poder suportar una temperatura de 28,8°C. Per a escollir el valor d'aquest límit es fa servir la *Figura 11.2* del present manual de càlcul.

En aquest cas es fan servir dos materials diferents de la mateixa manera que es fa per a tots aquells equips que treballen amb òxids de nitrogen. El primer d'ells, l'acer al carboni, es fa servir com a material de suport i resistència mecànica; el segon, tefló, es fa servir per al recobriment superficial de l'interior del reactor. El límit elàstic de l'acer al carboni per a una temperatura de 40 aproximadament pren un valor de 135 N/mm² (1350 atm).

Pel que fa el factor de soldadura, s'escull un valor de 0,85. Aquest correspon a una soldadura amb radiografiat parcial. La tolerància a la corrosió que s'aplica és de 2 mm perquè tenim sulfúric al 65% a la sortida. La tolerància a la fabricació és de 1 mm.

Amb tot aquest conjunt de dades ja es pot aplicar l'equació inicial per a obtenir el gruix del cos del reactor. El resultat que se n'obté de fer els càlculs és de 9,97mm, és a dir, es farà servir una xapa d'acer de 10mm.

- **Capçals torisfèrics**

Per a determinar el gruix d'aquest tipus de capçal es fa servir la següent equació de la normativa ASME:

$$t = \frac{MPL}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2$$

on:

- *P*.- pressió de disseny, atm
- *L*.- diàmetre de l'esfera que uneix els torus = diàmetre del cilindre (2444mm)
- *E*.- factor de soldadura (0,85)
- *S*.- límit elàstic del material de construcció (1350 atm)
- *C*₁.- tolerància a la corrosió, mm
- *C*₂.- tolerància a la fabricació, mm
- *M*.- factor tabulat per a una relació fixada de *L/r* (*M*=1,54)

Aquesta equació s'ha aplicat per a una relació de *L/r*=10 . Tots els valors coincideixen amb aquells que s'han fet servir per a calcular el gruix del cos cilíndric excepte la *P*. Aquesta pressió de disseny varia degut a que hi ha dos capçals i tots dos suporten una pressió diferent a la del cos del reactor. En el cas del capçal superior, la pressió de disseny és la pressió de operació sobredimensionada en un 30%, és a dir, 6,5atm. Pel que fa al capçal inferior, la pressió de disseny és aquella que ha de suportar el cilindre més la pressió de la columna de líquid que conté el capçal cònic, és a dir, 7,11atm.

Aplicant l'equació del gruix per capçals torisfèrics s'obté el següent gruix:

$$t_{\text{capçal sup erior}} = \frac{1,54 \cdot 6,5 \text{ atm} \cdot 2444 \text{ mm}}{2 \cdot 1350 \cdot 0,85 - 0,2 \cdot 6,5} + C_1 + C_2 = 13,2 \text{ mm} \rightarrow 12 \text{ mm}$$

- **Fons cònic**

La forma del capçal inferior és de tronc cònic (Figura 11.7). La zona més ample, és a dir, aquella que té el diàmetre més gran, està unida a la base del cos cilíndric. La zona més estreta té un diàmetre igual al de la canonada de descàrrega. Aquest equip es dissenya amb fons cònic per a facilitar la descàrrega de la suspensió que es forma amb la reacció ja que el producte és poc soluble en medi fortament àcid. L'equació mitjançant la qual es calcula el gruix d'aquest capçal és la següent:

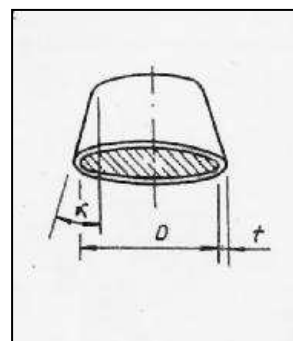


Figura 11.7.- Tronc cònic

$$t = \frac{P \cdot D}{2 \cdot \cos \alpha \cdot (SE - 0,6P)}$$

on:

- $\cos \alpha$.- cosinus de l'angle que forma la generatriu amb la base del tronc cònic ($\alpha < 30^\circ$)
- D .- diàmetre del reactor, m
- P .- pressió de disseny (7,11 atm)
- R .- radi gran del tronc cònic (1222 mm)
- r .- radi petit del tronc cònic (64 mm)
- $h_{\text{cònica}}$.- alçada del tronc cònic (350,9 mm)

Les dades que es fan servir són exactament iguals a les que s'han utilitzat per a calcular la resta de gruixos. La única dada variable és la pressió de disseny i el càlcul del $\cos(\alpha)$ que es fa a partir de les dades de la llegenda anterior. El gruix de fons cònic és de 10,4 mm, és a dir, es farà servir una xapa de 12 mm.

La camisa tindrà el mateix gruix que la part cilíndrica del cilindre ja que amb 5mm de gruix s'aguanten les 2 atm de pressió que exerceix el vapor a la camisa.

- **Càlcul del pes del reactor**

El pes de qualsevol recipient es calcula sempre de la mateixa manera. Primerament, mitjançant els gruixos de cadascuna de les parts del reactor, es calcula el volum de material que es fa servir. Posteriorment es multiplica aquest volum per la densitat del material del que anirà construït l'equip.

- Pes d'acer del cilindre ($Pes_{acer\ cilindre}$)

$$Pes_{acer\ cilindre} = \frac{\pi}{4} \cdot \left[\left(D_{reactor} + \frac{2 \cdot t_{cilindre}}{1000} \right)^2 - D_{reactor}^2 \right] \cdot H_{cilindre} \cdot \rho_{acer\ al\ carboni} = 1633,6kg$$

- Pes d'acer del capçal superior

$$Pes_{acer\ capçal} = \left(V_{torisfèric\ exterior} - V_{torisfèric\ interior} \right) \cdot \rho_{acer\ al\ carboni}$$

$$Pes_{acer\ capçal} = \left(0,0809 \cdot D_{torisfèric\ exterior}^3 - 0,0809 \cdot D_{reactor}^3 \right) \cdot \rho_{acer\ al\ carboni} = 275,8kg$$

$$D_{torisfèric\ exterior}^3 = \left(D_{reactor} + 2 \cdot t_{capçal} \right)^3$$

on:

- $V_{torisfèric} = 0,0809 \cdot D_{torisfèric}^3$ (segons bibliografia Perry, 1999)
- $D_{torisfèric\ interior} = D_{reactor}$
- $\rho_{acer\ al\ carboni} = 7850\ kg/m^3$

- Pes d'acer del fons cònic

$$Pes_{acer\ capçal} = \left(V_{cònic\ exterior} - V_{cònic\ interior} \right) \cdot \rho_{acer\ al\ carboni}$$

$$V_{cònic\ exterior} = \frac{\pi}{3} h_{cònica} \cdot \left((R+t)^2 + (r+t)^2 + (R+t)(r+t) \right) = 0,59m^3$$

$$V_{cònic\ interior} = \frac{\pi}{3} h_{cònica} \cdot \left(R^2 + r^2 + Rr \right) = 0,58m^3$$

$$Pes_{acer\ capçal} = 89,8kg$$

on:

- R.- és el radi gran del con (m)
- r.- és el radi petit del con (m)
- t.- és el gruix del fons cònic (m)

- Pes de l'equip

El pes total de l'equip buit és aquell que s'obté de sumar el pes de totes les parts de l'equip, és a dir, cos i capçals. Aquest pren un valor de 1999,2kg d'acer al carboni.

“Pes de l'equip buit = pes del cilindre + pes del capçal superior + pes del capçal inferior”

Quan l'equip està ple, s'ha d'afegir al pes de l'equip buit aquell pes que prové del producte entre el volum de líquid que hi a dintre del reactor i la seva densitat

“Pes de l'equip ple = pes de l'equip buit + $V_{equip} \cdot \rho_{fluid\ en\ operació}$ ”

El pes de l'equip ple ha de considerar la densitat de l'aigua si el fluid que ha de contenir té una densitat inferior a aquesta. Això és degut a que a la posta en marxa s'utilitzarà aigua per a fer la comprovació de les estanqueïtats dels equips. Com que aquest no és el cas, el pes es calcula amb la densitat del fluid en operació. El pes final, amb el reactor ple, és de 20297kg.

- **Disseny de l'agitador**

Quan es fa el disseny de l'agitador s'ha de tenir clar quin és l'objectiu d'aquest. En el cas del reactor de nitració el que es vol aconseguir és que hi hagi una bona mescla dels reactius i que amb la transferència de calor de la camisa no es presentin gradients de temperatura.

L'agitador que s'escull, per tal de dur a terme aquesta operació el més eficientment possible, és una turbina de disc amb sis pales. Aquestes turbines estan indicades per a mescles amb viscositat moderada i per a la dispersió de gasos.

- **Dimensionament de l'agitador**

L'agitador es dimensiona segons un disseny estàndard de turbina que ja s'ha vist a l'apartat 11.2.1 *Disseny del reactor de formació d'òxids de nitrogen*. Les distàncies i mides que resulten d'aplicar aquest estàndard són les següents:

Taula 11.40.- Dades de l'agitador

Paràmetre	Valor
Viscositat (kg/ms)	0,008
Amplada del bafle (m)	0,204
Diàmetre turbina (m)	1,22
Alçada turbina (m)	0,153
Distància fons-turbina (m)	0,391
Reynolds	315616
Np	1,63
Potència (W)	7088,4
N (rps)	1
Potència/volum (w/m³)	618,3

- **Càlcul de la potència de l'agitador**

La potència de l'agitador es calcula d'una forma o altra en funció de si el flux que es necessita és turbulent o laminar. En aquest cas, si es calcula el Reynolds s'obté un flux molt turbulent:

$$\text{Re} = \frac{D_a^2 \cdot N \cdot \rho}{\mu} = 3,16 \cdot 10^5$$

on:

- D_a .- diàmetre de la turbina, m
- N .- revolucions per segon de la turbina, rps
- ρ .- densitat de la mescla (1514 kg/m^3)
- μ .- viscositat, kg/ms

Amb aquest Reynolds es pot buscar el número de potència mitjançant la **Figura 11.4**. El N_p per a un $\text{Re} > 1 \cdot 10^5$ i una turbina de disc amb sis pales es de 6. Ara es determina la potència (P) mitjançant la següent equació:

$$P = N_p \cdot D_a^5 \cdot n^3 \cdot \rho = 7,1 \text{ kW}$$

L'agitador necessitarà aportar 7,1 kW a $11,5 \text{ m}^3$ de mescla. Això vol dir que es té una relació de $618,3 \text{ W/m}^3$. Aquesta relació serveix per a analitzar qualitativament l'agitació del recipient. Amb la **Figura 11.5** es pot comprovar que els requeriments de potència per a unes condicions de reacció homogènia i una bona transferència de calor es compleixen amb l'agitador i la velocitat d'agitació escollides.

11.2.4 Disseny del reactor de hidrogenació/acetilació (R-701)

Per a determinar el volum del reactor s'utilitza la patent US5648535 on es fa servir l'experiment número 5. Les dades que s'obtenen de la patent són les següents:

$$\tau = 32 \text{ min}$$

$$V_{\text{exp}} = 1,205 \text{ L}$$

$$Q_{v,\text{exp}} = 3,912 \cdot 10^{-2} \text{ L/min}$$

on:

- t .- temps de residència del reactor (min)
- V_{exp} .- volum de reacció de l'experiment (L)
- $Q_{v,exp}$.- cabal d'entrada de l'experiment (L/min)

Com se sap, el cabal de p-nitrophenol que s'ha de fer reaccionar per a obtenir la producció de paracetamol de més de 20 tones al dia és de 15,75 kg/min. S'ha de dimensionar el reactor a partir de les dades experimentals que s'obtenen a la patent.

$$V_{reactor} = \tau \cdot Q_v = 32 \text{ min} \cdot 60,54 \frac{\text{l}}{\text{min}} = 1937,28 \text{ l} = 1,94 \text{ m}^3 \rightarrow 3 \text{ m}^3$$

El cabal que s'ha introduït a l'equació (60l/min) és el cabal dels reactius menys el cabal d'hidrogen, degut a que la patent sobredimensiona el volum de procés. Està considerat que el petit cabal d'hidrogen que entra contínuament al reactor no fa augmentar el nivell del líquid en el reactor.

El volum del reactor se sobredimensiona lleugerament per tal de poder suportar possibles fluctuacions del cabal, i també per a que el nivell de líquid no arribi fins al sostre del tanc quan aquest es trobi en operació habitual.

A continuació s'exposen les dimensions del reactor. S'ha tingut en compte la calor alliberada en la reacció i per això, s'ha augmentat la relació d'alçada/diàmetre fins a 3 (mirant dades bibliogràfiques s'ha observat que aquesta és la màxima relació que pot tenir el reactor, degut a que si es té una relació més alta les turbulències produïdes dintre del reactor provoquen que el model de flux no sigui el desitjat). S'augmenta la relació fins al màxim perquè el nostre reactor allibera molta calor de forma que cal disminuir el diàmetre i fer el reactor més llarg. D'aquesta manera s'aconsegueix augmentar l'àrea de contacte per bescanviar la calor.

Finalment, les dimensions del reactor queden de la forma següent:

$$\text{Alçada } (H) = 3,16 \text{ m}$$

$$\text{Diàmetre } (D) = 1,1 \text{ m}$$

$$\text{Àrea}_{reactor} = \pi \cdot D \cdot H = 10,9 \text{ m}^2$$

El nivell de líquid necessari per a que el temps de residència sigui dels 32 minuts és:

$$V_{\text{líquid}} = 1,94 m^3$$

$$V_{\text{capçal}} = \frac{\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3}{2} = \frac{\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot (0,55 m)^3}{2} = 0,35 m^2$$

$$h_{\text{líquid}} = \frac{V_{\text{líquid}} - V_{\text{capçal}}}{\frac{\pi}{4} \cdot (1,1 m)^2} = 1,67 m$$

Això vol dir que el líquid té una ocupació en el volum del 66%.

- **Càlcul del cabal de líquid refrigerant al bescanviador de mitja canya**

Per conèixer quin és el cabal de líquid refrigerant que ha de passar pel la mitja canya i pel serpentí, s'ha efectuat un balança d'energia al reactor:

$$A = (E - S) + G$$

El terme d'acumulació (A), com treballem en estat estacionari serà zero.

$$\sum m_E \cdot Cp \cdot (T - T_E) - \frac{m_{kE}}{PM \cdot v_k} \cdot X_k \cdot \Delta H = Q$$

El primer terme, (E-S), és l'energia que es dona a l'aliment del reactor per a que tingui la temperatura de treball. La temperatura d'entrada d'aliment és de 25°C i la temperatura de treball és de 100°C.

El segon terme,(G), és la calor generada per la mescla degut a la reacció que es produeix.

$$\begin{aligned}
 & 15,75 \frac{\text{KgPNP}}{\text{min}} \cdot 1,035 \frac{\text{KJ}}{\text{Kg} \cdot \text{k}} + 10,725 \frac{\text{KgAc}_2\text{O}}{\text{min}} \cdot 2,133 \frac{\text{KJ}}{\text{Kg} \cdot \text{k}} + 0,679 \frac{\text{KgH}_2}{\text{min}} \cdot 14,1 \frac{\text{KJ}}{\text{Kg} \cdot \text{k}} + \\
 & + 39,975 \frac{\text{KgHOAc}}{\text{min}} \cdot 2,336 \frac{\text{KJ}}{\text{Kg} \cdot \text{k}} \cdot (373\text{k} - 298\text{k}) - \frac{15,75 \frac{\text{KgPNP}}{\text{min}}}{\frac{139,1 \text{KgPNP}}{1 \text{Kmol}} \cdot \frac{1 \text{Kmol}}{1000 \text{mol}}} \cdot 1 \cdot \\
 & \left(-559,47 \frac{\text{KJ}}{\text{mol}} \right) = -52682,89 \frac{\text{KJ}}{\text{min}} = -878048,18 \text{W}
 \end{aligned}$$

Un cop es té la calor que s'allibera, s'ha de mirar si es disposa de la suficient àrea de bescanvi en el reactor. Com es pot comprovar no es disposa d'aquesta àrea, i per tant cal introduir, al seu interior, un serpentí de tal manera que es pugui bescanviar tota la calor generada.

A continuació, es fan els càlculs per veure quin percentatge sobre el calor total es pot bescanviar amb la mitja canya;

$$A_{\text{bescanvi}} = \frac{Q}{U \cdot \Delta T_{ml}}$$

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T - T_{L1}) - (T - T_{L2})}{\ln \left(\frac{T - T_{L1}}{T - T_{L2}} \right)}$$

On:

- A .-Àrea de bescanvi entre el reactor i la camisa (m2).
- U .- Coeficient global de Calor de l'aigua glicolada amb 40% de glicol, 400 W/m2.°k.
- ΔTml.-Variació de la mitjana logarítmica de la temperatura.
- TL1.- Temperatura de entrada del líquid refrigerant (k).
- TL2.-Temperatura de sortida del líquid refrigerant (k).
- T .- Temperatura del reactor (k).

$$\Delta T_1 = 373K - 258K = 115K$$

$$\Delta T_2 = 373K - 263K = 110K$$

$$\Delta T_{ml} = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln\left(\frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}\right)} = \frac{115K - 110K}{\ln\left(\frac{115K}{110K}\right)} = 112,48K$$

$$A = \pi \cdot D \cdot h_{líquid} + 4 \cdot \pi \cdot R^2 = \pi \cdot 1,1m \cdot 1,67m + \frac{4}{2} \cdot \pi \cdot (0,55m)^2 = 7,67m^2$$

$$Q = U \cdot A \cdot \Delta T_{ml} = 400 \frac{W}{m^2 \cdot K} \cdot 7,67m^2 \cdot 112,48K = 345088,6W$$

$$m_{líquid} = \frac{Q}{C_p \cdot \Delta T} = \frac{345088,6W}{4008 \frac{J}{Kg \cdot K} \cdot (268K - 258K)} = 8,6 \frac{Kg}{s}$$

Amb l'àrea disponible del reactor es troba la quantitat de calor que es pot eliminar del reactor. La resta de calor s'ha de bescanviar amb un serpenti i per tant el disseny d'aquest es realitza per retrocés, és a dir, trobant l'àrea de bescanvi del serpenti a partir de la calor a bescanviar:

$$Q = 880000W - 345088,6W = 534911,4W$$

$$\Delta T_1 = 373K - 258K = 115K$$

$$\Delta T_2 = 373K - 268K = 105K$$

$$A = \frac{Q}{U \cdot \Delta T_{ml}} = \frac{534911,4W}{900 \frac{W}{m^2 \cdot K} \cdot 112,48K} = 5,28m^2$$

- **Disseny de la mitja canya**

Abans de realitzar el disseny de la mitja canya s'ha de seleccionar el fluid refrigerant que servirà per a bescanviar el calor generat al reactor. En aquest cas, aquest fluid es aigua glicolada amb un 40% de propilenglicol. El cabal màxim d'aquest a través de la mitja canya és de 8,6 kg/s.

A continuació, es calcula quin ha de ser el diàmetre de la mitja canya per aconseguir que el fluid circuli a una velocitat apropiada. En el cas de líquids aquesta està entre 1 i 3 m/s, per tant, s'intentarà treballar a la velocitat més alta possible per a afavorir la transferència d'energia.

Les fórmules emprades per a calcular les dimensions de la mitja canya són les següents:

$$Q_V = v \cdot A_{\frac{1}{2}canya}$$

$$A_{\frac{1}{2}canya} = \frac{\pi}{4 \cdot 2} \cdot D_{\frac{1}{2}canya}^2$$

$$D_{\frac{1}{2}canya} = \sqrt{\frac{Q_V \cdot 8}{v \cdot \pi}}$$

$$D_{\frac{1}{2}canya} = \sqrt{\frac{8,6 \frac{Kg}{s} \cdot \frac{1m^3}{1150Kg} \cdot 8}{3 \frac{m}{s} \cdot \pi}} = 0,08m$$

$$A_{\frac{1}{2}canya} = \frac{\pi}{4 \cdot 2} \cdot (0,08m)^2 = 2,5 \cdot 10^{-3} m^2$$

On:

- Q_V .- Cabal volumètric de refrigerant, m^3/s .
- $A_{1/2 canya}$.- Àrea de pas de la mitja canya , m^2 .
- $D_{1/2canya}$.-Diàmetre de la mitja canya, m .
- v .- Velocitat de pas, 1- 3 m/s.

S'ha trobat en la bibliografia (Sinnott R.K., 1983) que els diàmetres habituals d'aquestes camises de mitja canya, a la indústria, són entre 6 i 12 cm. En aquest cas, el diàmetre de la mitja canya és de 8 cm.

Se suposa que l'àrea que es perd entre els gruixos i soldadures és negligible. Es pot dir que l'àrea de bescanvi és de 7,67 m^2 en la zona cilíndrica i capçal inferior del reactor. Aquesta àrea ha estat extreta d'un càlcul.

A la *Figura 11.8* es pot apreciar la col·locació d'una mitja canya al voltant d'un recipient a on s'ha de dur a terme un bescanvi de calor.



Figura 11.8. Instal·lació d'un bescanviador de mitja canya al voltant d'un reactor

- **Disseny del serpentí**

El serpentí que es dissenya per a acabar de bescanviar tota l'energia que desprèn la reacció utilitza aigua glicolada com a líquid refrigerant. Anteriorment, s'ha calculat l'àrea de bescanvi necessària d'aquest serpentí. Els càlculs pel disseny del serpentí s'especifiquen a continuació:

$$L = \frac{A_{\text{sup}}}{\pi \cdot d} = \frac{5,28\text{m}^2}{\pi \cdot 0,066\text{m}} = 25,46\text{m}$$

La llargada del serpentí és de 25,46 m, el diàmetre que s'utilitza és de 6 cm més els 3 mm de gruix que ha de tenir el tub per aguantar les 34 atm de pressió d'operació (aquest càlcul es mostra a l'apartat de disseny mecànic del reactor). Un cop es té la llargada es decideix que el serpentí tindrà un diàmetre de 90 cm. A continuació, es calcularà l'alçada que del serpentí per a saber si està per sota de l'alçada del líquid al reactor. En cas contrari, s'haurà de fer més petit el serpentí.

$$L_{1volta} = \pi \cdot D = \pi \cdot 0,9m = 2,83m$$

$$n^{\circ} \text{ voltes} = \frac{L}{L_{1volta}} = \frac{25,46m}{2,83m} = 9\text{voltes}$$

$$h_{serpenti} = (0,066m + 0,015m) \cdot 9\text{voltes} = 0,73m$$

Per calcular l'alçada del serpentí es multiplica el diàmetre del tub més l'espai entre tubs pel nombre de voltes que fa el serpentí. L'alçada que s'obté està per sota de l'alçada del líquid de reactor per tant es prenen aquestes dimensions per a fer el disseny del serpentí.

A continuació es calcula el cabal d'aigua glicolada que haurà de passar pel serpentí i la seva velocitat.

$$m_{liquid} = \frac{Q}{Cp \cdot \Delta T} = \frac{534911,4W}{4008 \frac{J}{Kg \cdot k} \cdot (268K - 258K)} = 13,35 \frac{Kg}{s}$$

$$A_{serpenti} = \frac{\pi}{4} \cdot d^2 = \frac{\pi}{4} \cdot (0,066m)^2 = 3,4 \cdot 10^{-3} m^2$$

$$v = \frac{Q_v}{A_{serpenti}} = \frac{13,35 \frac{Kg}{s} \cdot \frac{1L}{1,15Kg} \cdot \frac{1m^3}{1000L}}{3,4 \cdot 10^{-3} m^2} = 3,4 \frac{m}{s}$$

- **Disseny mecànic del reactor**

Per determinar els gruixos d'equips necessaris, perquè la seva operació es dugui a terme amb garanties de seguretat i sense sobredimensionar innecessàriament, (el que es traduiria en un augment dels costos), se segueix la normativa ASME, que permet calcular els gruixos de cossos cilíndrics i dels seus capçals.

El gruix dels equips de reacció es calcularà en base a la pressió interna, degut a que la pressió externa és la pressió atmosfèrica.

○ **Cos cilíndric del reactor**

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

on:

- P .- Pressió de disseny.
- R .- Radi intern del cilindre, mm.
- E .- Factor de soldadura.
- S .- Límit elàstic (depèn del material escollit i de la temperatura de disseny)
- C_1 .- Tolerància a la corrosió, mm
- C_2 .- Tolerància a la fabricació, mm

Com que els reactors treballen a 34atm, la pressió d'operació serà la pressió esmentada amb anterioritat més la pressió que exerceix la columna de líquid en el reactor.

$$P \text{ (atm)} = \left(P_{op} + \rho g h_l \cdot \frac{1}{101325 \frac{N}{m^2}} \right) = 34,21 \text{ atm}$$

on:

- P_{op} .- Pressió d'operació.
- h_l .- Alçada de la columna de líquid.
- g .- Gravetat, $9,81 m/s^2$.
- ρ .- Densitat de la mescla a tractar.

El següent pas és designar la temperatura de disseny. El reactor d'hidrogenació i acetilació treballa a 100°C, llavors, la temperatura de disseny serà un 10% superior, (o sigui 110°C). La pressió serà de 34,21atm així la pressió disseny del reactor serà un 10% superior (37,63 atm).

Amb aquestes temperatures ja es poden buscar els valors de límit elàstics pel material de construcció utilitzat al reactor, AISI 316. S'observa a la *Figura 11.2* del present manual de càlcul que, per exemple, per una temperatura de disseny de 110°C el límit elàstic (S) és $S = 150 \text{ N/mm}^2 = 1480 \text{ atm}$.

El factor de soldadura escollit és un valor de 0,85, corresponent a una soldadura amb radiografiat parcial. El radi intern del reactor és de 550 mm i el valor de tolerància a la corrosió escollit ha estat 1,5 mm. Aquest valor és un valor estàndard, degut a que la majoria de la mescla és àcid acètic (àcid feble).

El valor de tolerància a la fabricació triat ha estat 1 mm. Amb totes les dades conegudes ja es pot procedir al càlcul dels gruixos necessaris:

$$t = \frac{37,63 \text{ atm} \cdot 550 \text{ mm}}{1480 \text{ atm} \cdot 0,85 - 0,6 \cdot 37,63 \text{ atm}} + 1,5 \text{ mm} + 1 \text{ mm} = 19,25 \text{ mm}$$

El gruix de material que del cos cilíndric és de 25mm. Això, és degut a que s'ha de triar un gruix que es comercialitzi superior al que s'ha trobat.

- **Capçals semiesfèrics.**

Els capçals semiesfèrics tenen la següent forma geomètrica:

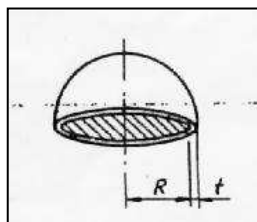


Figura 11.9. Geometria de capçal semiesfèric

A la Figura 11.9 la R és el radi de del cos cilíndric que serà igual al radi de l'esfera. La t és el gruix del capçal. L'equació per calcular aquest gruix de capçal semiesfèric del reactor és la següent:

$$t = \frac{P \cdot R}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2$$

$$t = \frac{37,63 \text{ atm} \cdot 550 \text{ mm}}{2 \cdot 1480 \text{ atm} \cdot 0,85 - 0,2 \cdot 37,63} + 1,5 \text{ mm} + 1 \text{ mm} = 10,75 \text{ mm}$$

El gruix dels capçals també serà de 25 mm, per la raó anteriorment esmentada (el gruix del capçal inferior haurà de ser com a mínim igual que al gruix del cilindre)

- **Serpentí.**

Després de mirar dades bibliogràfiques i parlar amb proveïdors, aquests han comentat que per una pressió de 34 atm amb 4 mm de gruix seria suficient. No s'ha pogut realitzar el càlcul numèric del gruix de l'aparell perquè la relació L/D dona massa gran. Es dimensiona el gruix per la seguretat que el serpentí aguantarà la pressió del reactor.

- **Càlcul de pes del reactor.**

Per a realitzar un càlcul acurat del pes dels equips aquests se separen en les seves diferents parts; una serà la part cilíndrica i les altres els capçals del reactor.

Pel càlcul del pes del reactor es fa servir el procediment descrit a la bibliografia (*Manual de recipientes*). La densitat del AISI 316 és 7980 Kg/m³ (material de construcció del reactor).

$$\begin{aligned} \text{Pes del cilindre} &: \frac{\pi}{4} \cdot \left((d + 2 \cdot t)^2 - d^2 \right) \cdot h \cdot \rho_{\text{AISI316}} = \\ &= \frac{\pi}{4} \cdot \left((1,1 \text{ m} + 2 \cdot 0,025 \text{ m})^2 - (1,1 \text{ m})^2 \right) \cdot 3,16 \text{ m} \cdot 7980 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} = 2228 \text{ Kg} \end{aligned}$$

Per trobar el volum del fons semiesfèric es calcula la diferència entre el volum exterior del fons i el seu volum interior.

$$Pes \text{ del fons: } \left(\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot (r+t)^3 - \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3 \right) \cdot \rho_{AISI 316} = 793,36Kg$$

El pes que s'ha calculat és el pes dels dos capçals del reactor. Per trobar el pes total de tot el reactor buit, s'ha de seguir la següent formula:

$$\text{“Pes equip buit} = \text{pes cilindre} + \text{pes dels capçals} + \text{pes agitador”}$$

En canvi, per trobar el pes del reactor en operació; un cop es té el pes de l'equip buit, només s'ha de sumar el pes del fluid que hi ha dintre del reactor. Si el fluid d'operació té una densitat inferior a la de l'aigua, és convenient tenir en compte el pes de l'equip ple d'aigua.

- **Càlcul de l'agitador.**

En el reactor hi ha dos tipus d'agitació; l'agitació mecànica mitjançant turbines i a més, es fa servir hidrogen que s'introdueix en el reactor a través d'un difusor per la part inferior.

Els diferents objectius de l'agitador mecànic seran els següents:

- *Homogeneïtzar la mescla, per evitar gradients de temperatura.*
- *Evitar que el catalitzador es dipositi en el fons del reactor.*
- *Facilitar la reacció d'hidrogenació.*

Com s'ha calculat, la difusió de l'hidrogen en la mescla no serà bona. Per aquest motiu, l'ajuda de l'agitador forçarà aquesta difusió, de tal manera que la primera reacció (hidrogenació) sigui afavorida.

En el reactor s'opta per un agitador amb les pales de les turbines força verticals. Amb això, es provoquen més fluctuacions en el líquid per facilitar la transferència de matèria entre el líquid i el gas. Un altre motiu és per aconseguir que el catalitzador arribi fins a la part superior del reactor, obtenint així una bona homogeneïtzació del tanc, i que la seva geometria en forma de columna no esdevingui un problema.

- **Dimensionament de l'agitador**

L'agitador té l'eix en el centre del reactor. Això, significa que s'han d'instal·lar bafles per evitar l'aparició de vòrtex, fet que dificulta l'operació del reactor i a més facilita la difusió de l'hidrogen en el líquid. S'instal·len 4 bafles, tenint en compte la següent equació:

$$w = \frac{1}{12} \cdot D = \frac{1}{12} \cdot 1,1m = 0,09m$$

On:

- *w*.- amplada del bafle (m).
- *D*.- diàmetre del reactor (m).

El diàmetre de les turbines (*d*) té un valor típic que està entre la meitat i un terç del diàmetre del reactor, segons la bibliografia (Perry, 1999). Ara s'agafarà la meitat del diàmetre del reactor, això suposarà:

$$d = 0,55m$$

En el Perry també s'ha obtingut una altra dada bibliogràfica, que és l'amplada de la turbina (*W*), la qual es calcula:

$$W = 0,2 \cdot d = 0,2 \cdot 0,55m = 0,11m$$

Per últim, es calcularà la distància entre la turbina i el difusor (*h*).

$$h = 0,16 \cdot D = 0,16 \cdot 1,1m = 0,176m$$

- **Càlcul de la potència dels agitadors.**

Per calcular la potència de l'agitador es calcula segons el nombre adimensional de Reynolds turbulent, que es defineix a continuació:

$$Re = \frac{d_i^2 \cdot N \cdot \rho}{\mu} = \frac{(0,55m)^2 \cdot 1rps \cdot 1049 \frac{Kg}{m^3}}{0,00122 \frac{Kg}{m \cdot s}} = 260100$$

on:

- ρ .- densitat del fluid (Kg/m^3).
- μ .- viscositat del fluid ($\text{Kg}/\text{m}\cdot\text{s}$)
- N .- velocitat de l'agitador (rps).
- d_i .- diàmetre de l'agitador (m).

Els valors de densitat i viscositat de la mescla s'han agafat els valors de l'àcid acètic, perquè és el component majoritari en el reactor. Un cop s'ha obtingut el nombre de Reynolds i se sap el tipus de turbina a utilitzar, es determina el número de potència. En aquest cas el Re és de $2 \cdot 10^5$. A la *Figura 11.4* es pot observar la corba corresponent a la turbina número 1, llavors s'obté un $N_p=3$. Ja es pot calcular la potència que necessitarà l'agitador.

$$P = N_p \cdot d^5 \cdot N^3 \cdot \rho = 3 \cdot (0,55\text{m})^5 \cdot (1\text{rps})^3 \cdot 1049 \frac{\text{Kg}}{\text{m}^3} = 158,4\text{w}$$

11.2.5 Disseny del reactor de neutralització d'àcids (R-501)

L'àrea 500 de recuperació d'aigües mare segrega un corrent residual de caps de la columna flash (S-501) amb àcid nítric i àcid sulfúric (corrent n°75 del diagrama de procés) Aquest corrent no es pot reutilitzar i, per tant, s'haurà de tractar mitjançant una neutralització amb sosa (NaOH). D'aquí s'obté una dissolució aquosa amb nitrat de sodi (NaNO_3) i sulfat de sodi (Na_2SO_4). Per a determinar el volum del reactor es fa ús del cabal residual d'àcid que es produeix i també d'un temps de residència fixat de 15 minuts. Així el resultat és el següent:

$$\tau = 15 \text{ min}$$

$$V_{\text{líquid}} = Q_{\text{àcid}} \cdot \tau = 0.356 \text{ m}^3$$

on:

- t .- temps de residència del reactor (min)
- $V_{\text{líquid}}$.- volum de reacció de, m^3
- $Q_{\text{líquid}}$.- cabal d'entrada de corrent àcid, m^3/min

Per a fer el dimensionament de l'equip se segueix el mateix esquema de càlcul que s'ha utilitzat pels reactors especificats anteriorment.

Com que el reactor es dissenya amb fons i capçal torisfèrics la relació alçada/diàmetre que es fa servir inicialment es calcula amb l'alçada i volum de líquid que hi hauria d'haver aproximadament al reactor un cop estigués en operació. Es decideix aplicar una relació alçada de líquid/diàmetre de 1.

$$H_{\text{líquid}} = D_{\text{reactor}}$$

$$V_{\text{líquid}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{reactor}}^2 \cdot H_{\text{líquid}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{reactor}}^2 \cdot D_{\text{reactor}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{reactor}}^3$$

$$D_{\text{reactor}} = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot V_{\text{líquid}}}{\pi}} = 0,768 \text{ m}$$

on:

- $H_{líquid}$.- alçada aproximada de líquid a dintre del reactor, m
- $D_{reactor}$.- diàmetre del reactor, m
- $V_{líquid}$.- volum de líquid a dintre del reactor, m^3

Per a sobredimensionar la mida del recipient es recalcula l'alçada de líquid real que hi haurà a dintre del reactor. Aquest càlcul té en compte que el fons torisfèric allotja una part del volum de líquid total del reactor ($V_{torisfèric}$). Sabent aquest volum de líquid que es trobarà a dintre del capçal, es pot saber el volum ($V_{líquid cilindre}$) i l'alçada de líquid ($H_{líquid cilindre}$) reals que hi hauran a la part cilíndrica del recipient. A continuació es representen les dimensions obtingudes:

$$V_{líquid} = V_{líquid cilindre} + V_{torisfèric} = V_{líquid cilindre} + 0,0809 \cdot D_{reactor}^3 = 0,356 m^3$$

$$V_{líquid cilindre} = V_{líquid} - V_{torisfèric} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{reactor}^2 \cdot H_{líquid cilindre}$$

$$H_{TOTAL líquid} = H_{líquid cilindre} + H_{torisfèric} = \frac{V_{líquid cilindre}}{\frac{\pi}{4} \cdot D_{reactor}^2} + H_{torisfèric} = 0,828 m$$

$$H_{Reactor} = 1,3 \cdot H_{líquid cilindre} + 2 \cdot H_{torisfèric} = 1,173 m$$

on:

- $H_{reactor}$.- alçada total del reactor, m
- $H_{TOTAL líquid}$.- nivell de líquid al reactor, m

- **Balanç d'energia del reactor**

Aquest reactor no tindrà cap tipus de bescanvi de calor però s'ha de comprovar si necessitaria un aïllant tèrmic o no. El que es busca calcular aquí serà la temperatura a la que arribarà la paret del reactor. Si aquesta temperatura arriba als 50°C s'haurà de posar un aïllant tèrmic per seguretat. Si la temperatura no arriba a 50°C el reactor de neutralització no necessitarà aïllant.

$$\sum n_{j,entrada} \cdot C_{pm,j} \cdot (T_2 - T_{1,j}) - \frac{n_k}{v_k} X_k \cdot \Delta H = q = 0 \text{ kJ / s}$$

on:

- $n_{j,entrada}$.- cabal molar de les dissolucions d'entrada al reactor, kmol/s
- $C_{pm,j}$.- calor específic de la mescla per a cada dissolució d'entrada al reactor, kJ/kmol K
- T_2 .- temperatura de reacció, °C
- T_1 .- temperatura d'entrada de les dissolucions ($T_{NaOH}=25$ °C; $T_{corrent75}=40$ °C)
- n_k .- cabal molar del reactiu limitant, kmol/s
- X_k .- grau de conversió
- ΔH .- variació d'entalpia de la reacció global (-783,6 kJ/kmol)
- ΔH_f , productes, ΔH_f , reactius.- variació d'entalpies de formació de productes i reactius, kJ/kmol

La temperatura resultant del balanç energètic és de 39,5°C, per tant, no es necessitarà aïllant tèrmic per al reactor de neutralització.

- **Disseny mecànic del reactor**

El disseny funcional del reactor va seguit del disseny mecànic del mateix. Aquest últim té com a objectiu garantir la seguretat física d'operació mitjançant l'ajust de formes i gruixos de totes les parts de l'equip. Aquest disseny es realitza seguint la normativa ASME, tot i que, per a establir els gruixos mínims de cilindres i capçals, s'aplicaran els valors de la Figura 11.1 del present manual de càlcul on ja es troben inclosos 2 mm de tolerància a la corrosió:

El gruix del reactor es calcula en base a la pressió interna degut a que es treballa a pressió atmosfèrica.

- **Cos cilíndric**

L'equació que s'aplica per a calcular el gruix del cos del reactor ($t_{cilindre}$) per pressió interna és la següent:

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

on:

- P .- pressió de disseny, atm
- R .- radi intern del cilindre, mm
- E .- factor de soldadura
- S .- límit elàstic del material de construcció, atm
- C_1 .- tolerància a la corrosió, mm
- C_2 .- tolerància a la fabricació, mm

El primer que es mira a l'hora d'aplicar l'equació és la pressió de disseny. Aquesta serà el producte d'un sobredimensionament (30%) de la pressió a la que es vol normalment operar:

$$P \text{ (atm)} = \left(P_{op} + \rho g H_l \cdot \frac{1}{101325 \frac{N}{m^2}} \right) \cdot 1,3 = 1,39 \text{ atm}$$

on:

- P_{op} .- pressió d'operació (2atm)
- g .- gravetat (9,81m/s²)
- H_l .- alçada de la columna de líquid (1 m)
- ρ .- densitat de la mescla de reacció (1013,8 kg/m³)

La temperatura a la que es treballa també es té en compte ja que el límit elàstic dels materials depenen d'aquesta. El sobredimensionament que es fa és del 15%. Així, el límit elàstic que s'emptra ha de poder suportar una temperatura de 40,2°C. Per a escollir el valor d'aquest límit es fa servir la Figura 11.2.

El material que es fa servir és l'acer al carboni amb un límit elàstic de 1350 atm. Pel que fa el factor de soldadura, s'escull un valor de 0,85. Aquest correspon a una soldadura amb radiografiat parcial. La tolerància a la corrosió que s'aplica és de 1,5 mm perquè tenim components de sortida (RCTA) i per tant una solució de Na_2SO_4 i NaNO_3 amb aigua. La tolerància a la fabricació és de 1 mm.

Amb tot aquest conjunt de dades ja es pot aplicar l'equació inicial per a obtenir el gruix del cos del reactor. El resultat que se n'obté de fer els càlculs és de 2,97 mm. Com que el reactor fa menys d'un metre de diàmetre s'escull un gruix mínim de 5mm segons la Figura 11.1 de gruixos mínims en funció del diàmetre del recipient.

o **Capçals torisfèrics**

Per a determinar el gruix d'aquest tipus de capçal es fa servir la següent equació de la normativa ASME:

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

on:

- *P*.- pressió de disseny, atm
- *L*.- diàmetre de l'esfera que uneix els torus = diàmetre del cilindre (768,4 mm)
- *E*.- factor de soldadura (0,85)
- *S*.- límit elàstic del material de construcció (1350 atm)
- *C*₁.- tolerància a la corrosió, mm
- *C*₂.- tolerància a la fabricació, mm

Aquesta equació s'aplica per a relacions de r/L de 0,6 . Tots els valors coincideixen amb aquells que s'han fet servir per a calcular el gruix del cos cilíndric excepte la P. Aquesta pressió de disseny varia degut a que hi ha dos capçals i tots dos suporten una pressió diferent a la del cos del reactor. En el cas del capçal superior, la pressió de disseny és la pressió de operació sobredimensionada en un 30%, és a dir, 1,3 atm. Pel que fa al capçal inferior, la pressió de disseny és aquella que ha de suportar el cilindre més la pressió de la columna de líquid que conté el capçal torisfèric, és a dir, 1,41atm.

Aplicant l'equació del gruix per capçals torisfèrics s'obtenen els següents gruixos:

$$t_{\text{capçal sup erior}} = \frac{0,885 \cdot 1,3 \text{ atm} \cdot 768,4 \text{ mm}}{1350 \cdot 0,85 - 0,1 \cdot 1,3} + C_1 + C_2 \rightarrow 4 \text{ mm}$$

$$t_{\text{capçal inf erior}} = \frac{0,885 \cdot 1,41 \text{ atm} \cdot 768,4 \text{ mm}}{1350 \cdot 0,85 - 0,1 \cdot 1,41 \text{ atm}} + C_1 + C_2 \rightarrow 5 \text{ mm}$$

El gruix del capçal inferior s'arrodoneix a un gruix de 4mm però el gruix del capçal inferior ha de ser com a mínim igual o superior a aquell que s'utilitza pel cos del recipient, és a dir, 5mm.

○ **Càlcul del pes del reactor**

El pes de qualsevol recipient es calcula sempre de la mateixa manera. Primerament, mitjançant els gruixos de cadascuna de les parts del reactor, es calcula el volum de material que es fa servir. Posteriorment es multiplica aquest volum per la densitat del material del que anirà construït l'equip. Els resultats sobre el pes de les diferents parts del reactor es poden trobar a la corresponent fulla d'especificació de l'equip així com les dimensions detallades d'aquest.

• **Disseny de l'agitador**

Quan es fa el disseny de l'agitador s'ha de tenir clar quin és l'objectiu d'aquest. En el cas del reactor de neutralització el que es vol aconseguir és que hi hagi una bona mescla dels reactius.

L'agitador que s'escull, per tal de dur a terme aquesta operació el més eficientment possible, és una turbina de disc amb sis pales. Les característiques de l'agitador són les següents:

Taula 11.41.- Característiques principals de l'agitador

viscositat (kg/ms)	0,001
Amplada del bafle (m)	0,064
Diàmetre turbina (m)	0,384
Amplada turbina (m)	0,077
Distància fons-turbina (m)	0,123
Reynolds	158921,209
Np	5
Potència (W)	42,421
N (rps)	1
Potència/volum (W/m ³)	132,705

11.3 DISSENY DE COLUMNES DE DESTIL·LACIÓ

11.3.1 Disseny de la columna de destil·lació d'acètic i aigua (C-701)

En l'àrea (A-800) corresponent a la zona de purificació del paracetamol es té una columna de destil·lació binària. La funció d'aquesta columna consisteix en realitzar la separació d'una barreja que conté àcid acètic glacial i aigua, per tal de recuperar gran part d'aquest àcid i així reutilitzar-lo.

Per a poder realitzar un balanç de matèria més acurat i tenir una idea del grau de separació que aquesta columna pot donar a les condicions de treball desitjades, es realitza el dimensionament d'aquest equip mitjançant el mètode del “*Short Cut Distillation*” i seguidament del mètode rigorós “*Distillation Column*”.

Inicialment s'ha definit el corrent d'entrada a la columna, corrent 55 corresponent a la nomenclatura del diagrama de procés, el qual s'ha caracteritzat a partir de determinar un *fluid package* adient per a la mescla a més a més d'especificar les condicions d'operació per les quals es vol treballar.

En la **Figura 11.10** es mostra les dades més importants del corrent de l'aliment:

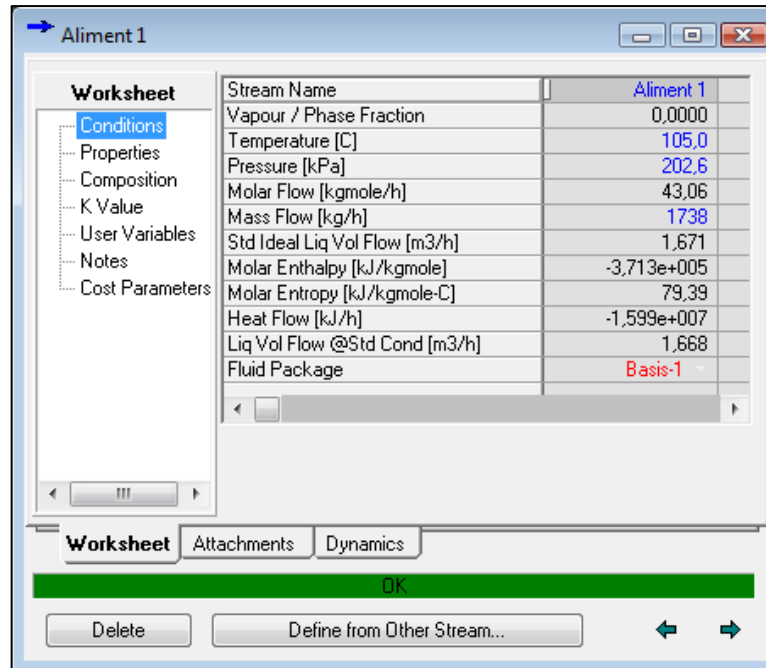


Figura 11.10. Caracterització del aliment d'entrada a la columna

Worksheet	Stream Name	Aliment 1	Liquid Phase
Conditions	Molecular Weight	40,35	40,35
Properties	Molar Density [kgmole/m3]	23,42	23,42
Composition	Mass Density [kg/m3]	944,9	944,9
K Value	Act. Volume Flow [m3/h]	1,839	1,839
User Variables	Mass Enthalpy [kJ/kg]	-9202	-9202
Notes	Mass Entropy [kJ/kg-C]	1,967	1,967
Cost Parameters	Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	89,40	89,40
	Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	2,215	2,215
	Lower Heating Value [kJ/kgmole]	4,179e+005	4,179e+005
	Mass Lower Heating Value [kJ/kg]	1,036e+004	1,036e+004
	Phase Fraction [Vol. Basis]	<empty>	1,000
	Phase Fraction [Mass Basis]	2,122e-314	1,000
	Partial Pressure of CO2 [kPa]	0,0000	<empty>
	Cost Based on Flow [Cost/s]	0,0000	0,0000
	Act. Gas Flow [ACT_m3/h]	<empty>	<empty>
	Avg. Liq. Density [kgmole/m3]	25,77	25,77
	Specific Heat [kJ/kgmole-C]	89,40	89,40
	Std. Gas Flow [STD_m3/h]	1018	1018
	Std. Ideal Liq. Mass Density [kg/m3]	1040	1040
	Act. Liq. Flow [m3/s]	5,108e-004	5,108e-004
	Z Factor	2,753e-003	2,753e-003
	Watson K	8,443	8,443
	User Property	<empty>	<empty>
	Cp/(Cp - R)	1,103	1,103
	Cp/Cv	1,305	1,305
	Heat of Vap. [kJ/kgmole]	3,122e+004	<empty>
	Kinematic Viscosity [cSt]	1,019	1,019
	Liq. Mass Density [Std. Cond] [kg/m3]	1042	1042
	Liq. Vol. Flow [Std. Cond] [m3/h]	1,668	1,668
	Liquid Fraction	1,000	1,000
	Molar Volume [m3/kgmole]	4,271e-002	4,271e-002

Figura 11.11. Propietats físiques i químiques del corrent d'entrada

En les següents figures es mostren les característiques més rellevants de la mescla d'entrada.

Worksheet		Mass Flows	Liquid Phase
Conditions	AceticAcid	1374,1	1374,1
Properties	H2O	363,52	363,52
Composition		363.52 kg/h	
K Value		801.42 lb/hr	
User Variables			
Notes			
Cost Parameters			

Figura 11.12 Cabals màssics en kg/h de la mescla d'entrada

Worksheet		Mass Fractions	Liquid Phase
Conditions	AceticAcid	0,790795	0,790795
Properties	H2O	0,209205	0,209205
Composition			
K Value			
User Variables			
Notes			
Cost Parameters			

Figura 11.13 Fraccions màssiques de la mescla d'entrada

Seguidament s'ha determinat la columna del *Short Cut* mitjançant l'aliment introduït, s'ha considerat que la part que surt per caps de columna surt en forma líquida a més a més d'introduir la fracció de separació que es vol obtenir, és a dir, el component clau lleuger (Aigua) que surt per cues i el component clau pesat (Àcid acètic glacial) que surt per caps. Aquest mètode permet obtenir una relació de reflux mínima aproximada per la qual ha de treballar així com el número de plats que la columna ha de contenir per a realitzar la separació desitjada i els cabals de sortida de tots els corrents.

Amb les dades proporcionades pel *Short Cut* es pot procedir a la realització del mètode rigorós, en el qual s'introdueixen les dades que el Short cut ha aproximat : Relació de reflux externa, número de plats, plat de l'aliment i cabals molars de caps i cues. D'aquesta manera, si les dades proporcionades pel Hysys són les desitjades per a realitzar la separació d'aquesta barreja, ja es pot determinar les dimensions de la columna a utilitzar.

A continuació es mostra les dades obtingudes en els corrents de sortida per caps de la columna de destil·lació binària.

Worksheet		Mass Fractions	Aqueous Phase
Conditions	AceticAcid	0,361334	0,361334
Properties	H2O	0,638666	0,638666
Composition			
K Value			
User Variables			
Notes			
Cost Parameters			

Figura 11.14 Fraccions màssiques del corrent de sortida per caps de la columna de destil·lació.

Worksheet		Mass Flows	Aqueous Phase
Conditions	AceticAcid	205,63	205,63
Properties	H2O	363,46	363,46
Composition			
K Value			
User Variables			
Notes			
Cost Parameters			

Figura 11.15 Cabals màssics (kg/h) del corrent de sortida per caps de la columna de destil·lació.

A continuació es mostra les dades obtingudes en els corrents de sortida per cues de la columna de destil·lació binària.

Worksheet		Mass Flows	Liquid Phase
Conditions	AceticAcid	1168,5	1168,5
Properties	H2O	6,3856e-002	6,3856e-002
Composition			
K Value			
User Variables			
Notes			
Cost Parameters			

Figura 11.16 Cabals màssics (kg/h) del corrent de sortida per cues de la columna de destil·lació.

Worksheet	Mass Fractions		Liquid Phase
	AceticAcid	0,999945	0,999945
H2O	0,000055	0,000055	
Conditions			
Properties			
Composition			
K Value			
User Variables			
Notes			
Cost Parameters			

Figura 11.17 Fraccions màssiques del corrent de sortida per cues de la columna de destil·lació.

Finalment s'obtenen les dimensions de la columna, les quals es mostren en la següent figura:

Tray Results		
Section	Section_1	Section_2
Internals	Sieve	Sieve
Section Diameter [m]	0,7620	0,9144
Max Flooding [%]	72,70	76,84
X-Sectional Area [m ²]	0,4560	0,6567
Section Height [m]	7,925	4,267
Section DeltaP [kPa]	5,606	3,505
Number of Flow Paths	1	1
Flow Length [mm]	596,9	711,2
Flow Width [mm]	674,6	811,2
Max DC Backup [%]	20,99	21,20
Max Weir Load [m ³ /h-m]	14,32	17,19
Max DP/Tray [kPa]	0,534	0,517
Tray Spacing [mm]	609,6	609,6
Total Weir Length [mm]	473,7	574,7
Weir Height [mm]	50,80	50,80
Active Area [m ²]	0,4027	0,5769

Figura 11.18 Dimensions de la columna de destil·lació

11.3.2 Disseny de la columna de destil·lació flash (S-801)

En l'àrea 800 corresponent a la zona de purificació del paracetamol es té una columna de destil·lació sobtada. La funció d'aquesta columna consisteix en la separació d'una mescla multi-component (corrent n°58 del diagrama de procés) la qual està formada per àcid acètic, acetoxiacetaminofenol i acetaminofenol. El interès principal de realitzar aquesta separació és per a eliminar el 80 % de l'àcid acètic que aquesta mescla conté abans de realitzar la cristal·lització del producte d'interès, ja que si aquesta barreja conté un percentatge molt elevat de l'àcid, el producte (APAP) quedaria tot dissolt en solució i per tant, el rendiment de cristal·lització del producte baixaria considerablement.

Per a poder obtenir un disseny de la columna de separació més acurat i obtenir valors més fiables de les composicions i cabals de separació, s'ha optat per a realitzar una simulació amb el Hysys. S'ha pogut observar que la separació obtinguda ha estat la desitjada ja que s'ha obtingut una separació d'aquest àcid per caps de columna del 80%, el qual serà recirculat a l'entrada del reactor d'acetil·lació- hidrogenació.

A continuació es mostra la caracterització del corrent d'entrada a la columna (corrent 58).

Taula 11.42. Caracterització de les composicions i cabals del corrent 58.

Component	Kg/min	Xmàssica
Àcid acètic glacial	16,0314	0,920
Acetaminofenol	1,3146	0,075
Acetoxiacetaminofenol	0,08354	0,005

Worksheet	Stream Name	1	Vapour Phase	Liquid Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0,7575	0,7575	0,2425
Properties	Temperature [C]	101,3	101,3	101,3
Composition	Pressure [kPa]	50,66	50,66	50,66
K Value	Molar Flow [kgmole/h]	16,57	12,55	4,019
User Variables	Mass Flow [kg/h]	1046	754,2	291,5
Notes	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	1,007	0,7174	0,2895
Cost Parameters	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-4,313e+005	-4,295e+005	-4,369e+005
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	155,7	178,6	84,28
	Heat Flow [kJ/h]	-7,148e+006	-5,391e+006	-1,756e+006
	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	0,9649	0,7036	0,2614
	Fluid Package	Basis-2		

Figura 11.20. Caracterització de les condicions del corrent d'entrada a la columna (58).

Worksheet	Stream Name	1	Vapour Phase	Liquid Phase
Conditions	Molecular Weight	63,10	60,08	72,53
Properties	Molar Density [kgmole/m3]	2,148e-002	1,628e-002	13,93
Composition	Mass Density [kg/m3]	1,355	0,9779	1010
K Value	Act. Volume Flow [m3/h]	771,6	771,3	0,2886
User Variables	Mass Enthalpy [kJ/kg]	-6835	-7148	-6024
Notes	Mass Entropy [kJ/kg-C]	2,468	2,972	1,162
Cost Parameters	Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	89,35	78,38	123,6
	Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	1,416	1,305	1,704
	Lower Heating Value [kJ/kgmole]	8,887e+005	7,875e+005	1,205e+006
	Mass Lower Heating Value [kJ/kg]	1,408e+004	1,311e+004	1,661e+004
	Phase Fraction [Vol. Basis]	0,7125	0,7125	0,2875
	Phase Fraction [Mass Basis]	0,7212	0,7212	0,2788
	Partial Pressure of CO2 [kPa]	0,0000	<empty>	<empty>
	Cost Based on Flow [Cost/s]	0,0000	0,0000	0,0000
	Act. Gas Flow [ACT_m3/h]	<empty>	771,3	<empty>
	Avg. Liq. Density [kgmole/m3]	16,46	17,50	13,88
	Specific Heat [kJ/kgmole-C]	89,35	78,38	123,6
	Std. Gas Flow [STD_m3/h]	391,8	296,8	95,03
	Std. Ideal Liq. Mass Density [kg/m3]	1039	1051	1007
	Act. Liq. Flow [m3/s]	8,016e-005	<empty>	8,016e-005
	Z Factor	<empty>	1,000	1,169e-003
	Watson K	8,607	8,445	9,037
	User Property	<empty>	<empty>	<empty>
	Cp/(Cp - R)	1,103	1,119	1,072
	Cp/Cv	1,076	1,119	1,529

Figura 11.21. Caracterització de les propietats físiques i químiques del corrent d'entrada a la columna

A continuació es mostren els valors obtinguts en la separació de la mescla multicomponent tant per caps com per cues de columna.

Taula 11.43. Caracterització del corrent de caps (Corrent 60). Cabals màssics i fracció màssica.

Component	Kg/min	Xmàssica
Àcid acètic glacial	12,55966667	0,9991
Acetaminofenol	0,011137167	0,000886
Acetoxiacetaminofenol	0	0

Taula 11.44. Caracterització del corrent de cues (Corrent 59). Cabals màssics i fracció màssica.

Component	Kg/min	Xmàssica
Àcid acètic glacial	3,471666667	0,714530
Acetaminofenol	1,303462833	0,268276
Acetoxiacetaminofenol	0,08354	0,017194

Per a poder determinar les dimensions de la columna de separació s'ha usat un procediment empíric, el qual ha estat extret de bibliografia (*Wankat, 1988*). Els passos que s'han seguit són els següents:

- **Càlcul de la velocitat permesa del vapor U_p (m/s). Màxima velocitat a la màxima àrea transversal.**

$$U_p = K_{drum} \cdot \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_V}{\rho_V}}$$

- K_{drum} : Constant empírica. Es troba mitjançant correlacions
- ρ_L : Densitat del líquid (kg/m^3)
- ρ_V : Densitat del vapor (kg/m^3)
- U_p : Velocitat permesa pel vapor (m/s)

- **Càlcul de K_{drum} . Mitjançant la correlació de Blackwell-Watkins'.**

$$K_{drum} = \exp[A + B \cdot \ln F_{IV} + C \cdot (\ln F_{IV})^2 + D \cdot (\ln F_{IV})^3 + E \cdot (\ln F_{IV})^4]$$

- A, B, C i D :Són constants. (*Blackwell , 1984*).
- $A=-1,877478097$
- $B=-0,8145804597$
- $C=-0,1870744085$
- $E=-0,0010148518$
- $D=-0,0145228667$

El valor de F_{IV} es calcula de la següent forma:

$$F_{IV} = \frac{W_L}{W_V} \cdot \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L}}$$

On:

- W_L : Cabal de líquid (Kg/s)
- W_V : Cabal de vapor (Kg/s)
- ρ_L : Densitat del líquid (kg/m^3)
- ρ_V : Densitat del vapor (kg/m^3)

- **Càlcul de l'àrea de pas (A) i el diàmetre del recipient:**

$$A = \frac{V \cdot M_w}{U_p \cdot \rho_v}$$

- V: Cabal de vapor (Kg/s)
- U_p : Velocitat permesa pel vapor (m/s)
- M_w : Pes molecular mescla
- ρ_v : Densitat del vapor (kg/m^3)

- **Càlcul de l'alçada de la columna de destil·lació sobtada.**

$$L/D \text{ entre } 3 \text{ i } 5 \quad D = \sqrt{\frac{4 \cdot A}{\pi}}$$

Un cop s'han realitzat aquests càlculs, els paràmetres obtinguts han estat els següents:

Taula 11.45. Càlcul de les dimensions de la columna de destil·lació sobtada (S-801).

Paràmetres	
Kdrum	0,3446
ρ_L (kg/m^3)	1010
ρ_V (kg/m^3)	0,9779
U_p	11,0701
L (Kg/s)	0,0810
V (kg/s)	0,2095
Mv	63,1000
ρ_V (kg/m^3)	0,9779
A (m^2)	1,2211
D (m) columna	1,2469
L (m) columna	3,7408

En l'àrea 500, corresponent a la recuperació de les aigües mare, es troba una altra columna de destil·lació sobtada flash la qual té com a objectiu concentrar l'àcid sulfúric al 70% i

així retornar-lo a l'àrea de preparativa de reactius. El dimensionament d'aquesta columna s'ha realitzat seguint el procediment empíric anterior.

La següent taula mostra els paràmetres més rellevants per al seu dimensionament.

Taula 11.46. Càlcul de les dimensions de la columna de destil·lació sobtada(S-501).

Paràmetres	
Kdrum	0,3215
ρ_L (kg/m ³)	1541
ρ_V (kg/m ³)	0,5253
Up	17,4109
L (Kg/s)	6,1831
V (kg/s)	0,3896
Mv	18,2300
ρ_V (kg/m ³)	0,5253
A (m ²)	0,7767
D (m) columna	0,9945
L (m) columna	2,9834

11.4 DISSENY DELS CRISTAL·LITZADORS

11.4.1 Disseny del cristal·litzador de para-nitrofenol (CR-601)

El cristal·litzador de para-nitrofenol s'utilitza per a eliminar les impureses que pugui contenir aquest producte intermedi abans que entri a la segona etapa de reacció. El medi de cristal·lització està format bàsicament per aigua però ajustada a un pH entre 5,4 i 6,4 i amb una concentració mínima de bisulfit sòdic de 0,5% en pes. En aquestes condicions el para-nitrophenol precipita selectivament, mentre que la resta d'impureses i dinitrofenols es mantenen en solució. La cristal·lització es realitza amb una baixada de temperatura sobtada ja que passa ràpidament de 40°C a 15°C. A continuació es presenten els càlculs del temps de residència de la cristal·lització i del disseny funcional de l'equip.

- **Disseny funcional del cristal·litzador**

El corrent d'entrada al cristal·litzador és el número 32 del diagrama de procés (*apartat Diagrames i plànols*). La composició d'entrada és la que es pot veure a la *Taula 11.47*:

Taula 11.47.- Composició del corrent d'entrada al cristal·litzador

	Entrada al Cristal·litzador (CR-601)	
	Kg/min	Fracció màssica
p-nitrofenol	16,7508	0,4711
o-nitrofenol	0,0011	3,08E-05
dinitrofenol	0,2241	0,0063
By-products	0,0080	0,0002
Aigua	18,6526	0,5143
Bisulfit sòdic	0,2016	0,0057
Sulfúric	0,0835	0,0023
TOTAL	35,9246	1,000

Aquí es veu com el percentatge de bisulfit sòdic és més gran del 0,5% mínim necessari per a fer la precipitació selectiva.

El volum d'entrada d'aquest corrent és de 1,79m³/h i el temps de residència ve determinat per la mida de les partícules de p-nitrofenol (L=150µm) i de la velocitat de creixement dels cristalls (G=2E-08 m/s):

$$\tau = \frac{L}{G} = \frac{150\mu\text{m} \cdot 1\text{E} - 06}{2\text{E} - 08 \cdot 3600} = 2,08\text{h}$$

$$V_{\text{cristal·litzador}} = 1,8 \frac{\text{m}^3}{\text{h}} \cdot 2,08\text{h} = 3,76\text{m}^3$$

El dimensionament de l'equip es realitza tenint en compte que ha de disposar d'un fons cònic per a afavorir la sortida del magma per la part inferior ja que aquest té una alta concentració de sòlids. Aquest dimensionament té com a restriccions inicials que l'alçada del fons cònic sigui igual a 1/3 de l'alçada de líquid a la part cilíndrica i que l'alçada de líquid de la part cilíndrica sigui igual al diàmetre del cristal·litzador. A partir d'aquestes dades inicials s'aplica un "solver" per a que la suma dels volums de líquid de la part cònica i la part cilíndrica sigui igual al volum de líquid total del reactor (V=3,76m³):

$$V_{\text{cristal·litzador}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{cristal·litzador}}^2 \cdot H_{\text{liquid cilindre}} + \frac{\pi}{3} \cdot \frac{H_{\text{liquid}}}{3} \cdot (R^2 + r^2 + Rr)$$

on:

- $D_{\text{cristal·litzador}}$.- diàmetre de la part cilíndrica del cristal·litzador ($D_{\text{cristal·litzador}}=H_{\text{liquid cilindre}}$)
- R .- radi del cristal·litzador, m
- r .- radi de descàrrega inferior (0,0381m)

Finalment, les dimensions del cristal·litzador queden de la següent manera:

Taula 11.48. Dimensions del cristal·litzador

Volum líquid (m3)	3,759
Diàmetre cilindre (m)	1,624
Alçada de líquid del cilindre (m)	1,624
Alçada cònica (m)	0,541
Volum líquid del cilindre (m3)	3,367
Volum con (m3)	0,392
Volum del cilindre sobredimensionat (m3)	4,040
Alçada cilindre (m)	1,949

- **Disseny mecànic del cristal·litzador**

El disseny mecànic del reactor és realitza exactament de la mateixa manera que en el cas de tots els equips especificats anteriorment, és a dir, complint la normativa ASME i si cal, fent ús de la Figura 11.1 on s'especifiquen els gruixos mínims del recipient en funció del seu diàmetre.

- **Cos cilíndric**

L'equació que s'aplica per a calcular el gruix del cos del reactor (t_{cilindre}) per pressió interna és la següent:

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

on:

- P .- pressió de disseny, atm
- R .- radi intern del cilindre, mm
- E .- factor de soldadura
- S .- límit elàstic del material de construcció, atm
- C_1 .- tolerància a la corrosió, mm
- C_2 .- tolerància a la fabricació, mm

El primer que es mira a l'hora d'aplicar l'equació és la pressió de disseny. Aquesta serà el producte d'un sobredimensionament (30%) de la pressió a la que es vol normalment operar:

$$P \text{ (atm)} = \left(P_{op} + \rho g H_l \cdot \frac{1}{101325 \frac{N}{m^2}} \right) \cdot 1,3 = 1,55 \text{ atm}$$

on:

- P_{op} .- pressió d'operació (1atm)
- g .- gravetat ($9,81 m/s^2$)
- H_l .- alçada de la columna de líquid al cilindre (1,62m)
- ρ .- densitat de la mescla de reacció ($1245 kg/m^3$)

La temperatura a la que es treballa també es té en compte ja que el límit elàstic dels materials depenen d'aquesta. El sobredimensionament que es fa és del 15%. Així, el límit elàstic que s'empra ha de poder suportar una temperatura de $17,25^\circ C$. Per a escollir el valor d'aquest límit es fa servir la *Figura 11.2* del present manual de càlcul.

En aquest cas es fa servir AISI304 que es compatible amb els compostos que tenim. El límit elàstic de l'AISI304 per a una temperatura de $17^\circ C$ aproximadament pren un valor de $165 N/mm^2$ (1650 atm).

Pel que fa el factor de soldadura, s'escull un valor de 0,85. Aquest correspon a una soldadura amb radiografiat parcial. La tolerància a la corrosió que s'aplica és de 1,5 mm perquè no tenim cap solució àcida. La tolerància a la fabricació és de 1 mm.

Amb tot aquest conjunt de dades ja es pot aplicar l'equació inicial per a obtenir el gruix del cos del reactor. El resultat que se n'obté de fer els càlculs és de 3,4mm, és a dir, es farà servir una xapa d'acer de 6mm ja que el diàmetre del cristal·litzador és superior a 1m.

o **Capçals torisfèrics**

Per a determinar el gruix d'aquest tipus de capçal es fa servir la següent equació de la normativa ASME:

$$t = \frac{MPL}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2$$

on:

- *P*.- pressió de disseny, atm
- *L*.- diàmetre de l'esfera que uneix els torus = diàmetre del cilindre (1617mm)
- *E*.- factor de soldadura (0,85)
- *S*.- límit elàstic del material de construcció (1650 atm)
- *C*₁.- tolerància a la corrosió, mm
- *C*₂.- tolerància a la fabricació, mm
- *M*.- factor tabulat per a una relació fixada de *L/r* (*M*=1,54)

Aquesta equació s'ha aplicat per a una relació de *L/r*=10 . Tots els valors coincideixen amb aquells que s'han fet servir per a calcular el gruix del cos cilíndric excepte la *P*. Aquesta pressió de disseny varia degut a que hi ha dos capçals i tots dos suporten una pressió diferent a la del cos del reactor. En el cas del capçal superior, la pressió de disseny és la pressió de operació sobredimensionada en un 30%, és a dir, 1,3atm. Pel que fa al capçal inferior, la pressió de disseny és aquella que ha de suportar el cilindre més la pressió de la columna de líquid que conté el capçal cònic, és a dir, 1,64atm.

Aplicant l'equació del gruix per capçals torisfèrics s'obté el següent gruix:

$$t_{\text{capçal sup erior}} = \frac{1,54 \cdot 1,3\text{atm} \cdot 1624\text{mm}}{2 \cdot 1650 \cdot 0,85 - 0,2 \cdot 1,3} + C_1 + C_2 = 3,65\text{mm} \rightarrow 4\text{mm}$$

○ **Fons cònic**

La forma del capçal inferior és de tronc cònic i, tal i com s'explica a l'apartat 11.2.2 *Disseny del reactor de nitració*, l'equació mitjançant la qual es calcula el gruix d'aquest capçal és la següent:

$$t = \frac{P \cdot D}{2 \cdot \cos \alpha \cdot (SE - 0,6P)}$$

on:

- $\cos \alpha$.- cosinus de l'angle que forma la generatriu amb la base del tronc cònic ($\alpha < 30^\circ$)
- D .- diàmetre del reactor, m
- P .- pressió de disseny (1,64atm)
- R .- radi gran del tronc cònic (1624mm)
- r .- radi petit del tronc cònic (38,1mm)
- $h_{cònica}$.- alçada del tronc cònic (541mm)

Les dades que es fan servir són exactament iguals a les que s'han utilitzat per a calcular la resta de gruixos. La única dada variable és la pressió de disseny i el càlcul del $\cos(\alpha)$ que es fa a partir de les dades de la llegenda anterior. El gruix de fons cònic és de 3,7mm però s'utilitzarà el mateix gruix que porta la part cilíndrica, és a dir, es farà servir una xapa de 6mm.

• **Càlcul del pes del reactor**

El pes de qualsevol recipient es calcula sempre de la mateixa manera. Primerament, mitjançant els gruixos de cadascuna de les parts del reactor, es calcula el volum de material que es fa servir. Posteriorment es multiplica aquest volum per la densitat del material del que anirà construït l'equip.

- Pes d'acer del cilindre ($Pes_{acer\ cilindre}$)

$$Pes_{acer\ cilindre} = \frac{\pi}{4} \cdot \left[\left(D_{reactor} + \frac{2 \cdot t_{cilindre}}{1000} \right)^2 - D_{reactor}^2 \right] \cdot H_{cilindre} \cdot \rho_{AISI304} = 473,2kg$$

- Pes d'acer del capçal superior

$$Pes_{acer\ capçal} = \left(V_{torisfèric\ exterior} - V_{torisfèric\ interior} \right) \cdot \rho_{AISI\ 304}$$

$$Pes_{acer\ capçal} = \left(0,0809 \cdot D_{torisfèric\ exterior}^3 - 0,0809 \cdot D_{reactor}^3 \right) \cdot \rho_{AISI\ 304} = 40,7\text{kg}$$

$$D_{torisfèric\ exterior}^3 = \left(D_{reactor} + 2 \cdot t_{capçal} \right)^3$$

on:

- $V_{torisfèric} = 0,0809 \cdot D_{torisfèric}^3$ (segons bibliografia Perry, 1999)
- $D_{torisfèric\ interior} = D_{reactor}$
- $\rho_{AISI304} = 7900\text{ kg/m}^3$

- Pes d'acer del fons cònic

$$Pes_{acer\ capçal} = \left(V_{cònic\ exterior} - V_{cònic\ interior} \right) \cdot \rho_{AISI\ 304}$$

$$V_{cònic\ exterior} = \frac{\pi}{3} h_{cònica} \cdot \left((R+t)^2 + (r+t)^2 + (R+t)(r+t) \right) = 0,404\text{m}^3$$

$$V_{cònic\ interior} = \frac{\pi}{3} h_{cònica} \cdot \left(R^2 + r^2 + Rr \right) = 0,392\text{m}^3$$

$$Pes_{acer\ capçal} = 92,7\text{kg}$$

on:

- R .- és el radi gran del con (m)
- r .- és el radi petit del con (m)
- t .- és el gruix del fons cònic (m)

- Pes de l'equip

El pes total de l'equip buit és aquell que s'obté de sumar el pes de totes les parts de l'equip, és a dir, cos i capçals. Aquest pren un valor de 606,7kg d'acer.

$$\text{"Pes de l'equip buit} = \text{pes del cilindre} + \text{pes del capçal superior} + \text{pes del capçal inferior"}$$

Quan l'equip està ple, s'ha d'afegir al pes de l'equip buit aquell pes que prové del producte entre el volum de líquid que hi a dintre del reactor i la seva densitat

$$\text{"Pes de l'equip ple} = \text{pes de l'equip buit} + V_{\text{equip}} \cdot \rho_{\text{fluid en operació}}"$$

El pes de l'equip ple ha de considerar la densitat de l'aigua si el fluid que ha de contenir té una densitat inferior a aquesta. Això és degut a que a la posta en marxa s'utilitzarà aigua per a fer la comprovació de les estanqueïtats dels equips. Com que aquest no és el cas, el pes es calcula amb la densitat del fluid en operació. El pes final, amb el reactor ple, és de 5286,6kg.

• **Balanç d'energia del cristal·litzador**

El balanç d'energia del cristal·litzador es porta a terme calculant l'energia que s'ha d'eliminar del corrent d'entrada ($\Delta T = 40 - 15 = 25^\circ\text{C}$) i afegint l'energia de precipitació del para-nitrofenol. El balanç energètic queda de la següent manera:

$$\sum m_{\text{entrada}} \cdot C_{pm} \cdot (T_2 - T_1) - m_{p\text{-nitrofenol pptada}} \cdot \Delta H_{\text{dissolució}} = q = -40,01 \text{ kJ / s}$$

on:

- m_{entrada} .- cabal màssic d'entrada al cristal·litzador (0,593kg/s)
- C_{pm} .- capacitat específica de la mescla d'entrada (2,65kJ/kg)
- T_2 .- temperatura de cristal·lització (15°C)
- T_1 .- temperatura d'entrada (40°C)
- $m_{p\text{-nitrofenol pptada}}$.- cabal màssic de p-nitrofenol que precipita (5,08E-03 kg/s)
- $\Delta H_{\text{dissolució}}$.- entalpia de dissolució del p-nitrofenol (135,2 kJ/kg)

Aquest calor l'haurà d'eliminar un sistema de bescanvi de calor que en aquest cas és una mitja canya que va per la paret externa del cristal·litzador tal i com es pot veure a la *Figura 11.8*. Per al bescanvi de calor es farà servir un corrent de 12,8m³/h d'aigua glicolada (40%) que passarà de -15°C a -12°C. El resultat d'aquest disseny queda de la següent forma:

Taula 11.49.- Dades de disseny de la mitja canya

Àrea de bescanvi tub (m2)	2,45
Velocitat (m/min)	54,5
Àrea de secció del tub (m2)	0,0039
Radi del tub (m)	0,05
Diàmetre del tub (m)	0,1
Longitud tub (m)	24,5
1 volta (m)	5,1
nº voltes mitja canya	4,8
Alçada mitja canya (m)	0,48
Distància entre volta-volta (m)	0,1
Alçada final de la mitja canya	0,96

Les fórmules emprades per a calcular les dimensions de la mitja canya són les següents:

$$Q_v = v \cdot A_{\frac{1}{2}canya}$$

$$A_{\frac{1}{2}canya} = \frac{\pi}{4 \cdot 2} \cdot D_{\frac{1}{2}canya}^2$$

$$D_{\frac{1}{2}canya} = \sqrt{\frac{Q_v \cdot 8}{v \cdot \pi}}$$

On:

- Q_v .- Cabal volumètric de refrigerant, m³/s.
- $A_{1/2 canya}$.- Àrea de pas de la mitja canya , m².
- $D_{1/2canya}$.-Diàmetre de la mitja canya, m.
- v .- Velocitat de pas, 1- 3 m/s.

- **Disseny de l'agitador**

Els cristal·litzadors requereixen una agitació lenta (0,5rps) amb un agitador tipus àncora per tal d'evitar incrustacions a la cara interna de les parets del cristal·litzador.

D'acord amb la informació trobada a la bibliografia (Perry, 1999), el diàmetre d'aquest tipus d'agitador és el 90% del diàmetre del tanc. Així doncs, el diàmetre de l'agitador d'aquest cristal·litzador pren el valor de 1,46m. A més, a la mateixa bibliografia també es parla del nombre de potència que per a aquest agitador és igual a 2. D'aquesta manera, es pot trobar la potència absorbida de l'agitador mitjançant la fórmula següent:

$$P = Np \cdot d^5 \cdot N^3 \cdot \rho = 2034W$$

on:

- *Np*.- nombre de potència (2)
- *ρ*.- densitat de la mescla (1245kg/m³)
- *N*.- velocitat d'agitació (0,5rps)
- *D*.- diàmetre de l'agitador, m
- *P*.- potència (w)

11.4.2 Disseny dels cristal·litzadors de paracetamol (CL-801/CL-802)

Els cristal·litzadors del paracetamol s'utilitzen per a purificar el producte final fins a un percentatge d'impureses <0,1%. Per a poder aconseguir el màxim grau de purificació, entre totes dues cristal·litzacions se sotmet a les aigües mare a una destil·lació flash per a reconcentrar el paracetamol i tornar-lo a cristal·litzar. Amb aquest procediment s'aconsegueix la puresa desitjada i no es perden grans quantitats de producte. A continuació s'explicarà en paral·lel el disseny d'aquests dos equips.

- **Disseny funcional dels cristal·litzadors**

Els corrents d'entrada als cristal·litzadors són el 51 i el 59 del diagrama de procés (apartat *Diagrames i plànols*). La composició d'entrada és la que es pot veure a la *Taula 11.50*:

Taula 11.50.- Composició del corrent d'entrada al cristal·litzador

Entrada al Cristal·litzador (CL-801)		
	<i>Kg/min</i>	<i>Fracció màssica</i>
Paracetamol	17,009	0,424782287
Acetoxiacetaminofen	0,131	0,003275097
Àc. acètic	22,902	0,571942616
TOTAL	40,042	1,000
Entrada al Cristal·litzador (CL-802)		
	<i>Kg/min</i>	<i>Fracció màssica</i>
Paracetamol	1,303	0,268270392
Acetoxiacetaminofen	0,084	0,017193607
Àc. acètic	3,472	0,714536001
TOTAL	4,859	1,000

Aquí es veu com concentració de producte a la segona cristal·lització disminueix més del 35% respecte de la primera cristal·lització.

El volum d'entrada d'aquests corrents són de 1,96m³/h i 0,24m³/h respectivament i el temps de residència ve determinat per la mida de les partícules de paracetamol (L=150µm) i de la velocitat de creixement dels cristalls (G=2E-08 m/s):

$$\tau = \frac{L}{G} = \frac{150\mu\text{m} \cdot 1\text{E} - 06}{2\text{E} - 08 \cdot 3600} = 2,08\text{h}$$

$$V_{CL-801} = 1,96 \frac{\text{m}^3}{\text{h}} \cdot 2,08\text{h} = 3,7\text{m}^3$$

$$V_{CL-802} = 0,24 \frac{\text{m}^3}{\text{h}} \cdot 2,08\text{h} = 0,5\text{m}^3$$

El dimensionament de l'equip es realitza tenint en compte que ha de disposar d'un fons cònic per a afavorir la sortida del magma per la part inferior ja que aquest té una alta concentració de sòlids. Aquest dimensionament té com a restriccions inicials que l'alçada del fons cònic sigui igual a 1/3 de l'alçada de líquid a la part cilíndrica i que l'alçada de líquid de la part cilíndrica sigui igual al diàmetre del cristal·litzador. A partir d'aquestes dades inicials s'aplica un "solver" per a que la suma dels volums de líquid de la part cònica i la part cilíndrica sigui igual al volum de líquid total del reactor:

$$V_{\text{cristal·litzador}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{\text{cristal·litzador}}^2 \cdot H_{\text{liquid cilindre}} + \frac{\pi}{3} \cdot \frac{H_{\text{liquid}}}{3} \cdot (R^2 + r^2 + Rr)$$

on:

- $D_{\text{cristal·litzador}}$.- diàmetre de la part cilíndrica del cristal·litzador ($D_{\text{cristal·litzador}}=H_{\text{liquid cilindre}}$)
- R .- radi del cristal·litzador, m
- r .- radi de descàrrega inferior (0,0318m)

Finalment, les dimensions dels cristal·litzadors es poden veure a la *Taula 11.51*:

Taula 11.51. Dimensions dels cristal·litzadors

Paràmetres	Cristal·litzador CL-801	Cristal·litzador CL-802
Volum líquid (m3)	3,759	0,496
Diàmetre cilindre (m)	1,624	0,826
Alçada de líquid del cilindre (m)	1,624	0,826
Alçada cònica (m)	0,541	0,275
Volum líquid del cilindre (m3)	3,367	0,440
Volum con (m3)	0,392	0,053
Volum del cilindre sobredimensionat (m3)	4,040	0,531
Alçada cilindre (m)	1,949	0,991

- **Disseny mecànic del cristal·litzador**

El disseny mecànic del cristal·litzador és realitza exactament de la mateixa manera que en el cas del cristal·litzador CR-601, és a dir, complint la normativa ASME i si cal, fent ús de la Figura 11.1 on s'especifiquen els gruixos mínims del recipient en funció del seu diàmetre. Els resultats de tots aquests càlculs es presenten a la les corresponents fulles d'especificacions del present projecte.

- **Balanç d'energia del cristal·litzador**

El balanç d'energia del cristal·litzador es porta a terme calculant l'energia que s'ha d'eliminar del corrent d'entrada i afegint l'energia de precipitació del paracetamol. El balanç energètic queda de la següent manera:

$$\sum m_{entrada} \cdot C_{pm} \cdot (T_2 - T_1) - m_{paracetamol\ pptada} \cdot \Delta H_{dissolució} = q$$

on:

- $m_{entrada}$.- cabal màssic d'entrada al cristal·litzador, kg/s
- C_{pm} .- capacitat específica de la mescla d'entrada, kJ/kg
- T_2 .- temperatura de cristal·lització (15°C)
- T_1 .- temperatura d'entrada, °C
- $m_{p\text{-nitrofenol pptada}}$.- cabal màssic de paracetamol que precipita, kg/s
- $\Delta H_{dissolució}$.- entalpia de dissolució del paracetamol, kJ/kg

Aquest calor l'haurà d'eliminar un sistema de bescanvi de calor que en aquest cas és una mitja canya que va per la paret externa del cristal·litzador tal i com es pot veure a la *Figura 11.8*. El corrent d'aigua que es necessita pel primer cristal·litzador és de 20,4m³/h amb un salt de temperatura de -15°C a -10,3°C. Pel segon cristal·litzador el cabal necessari és el mateix que pel primer ja que aquest s'aprofita per a fer un salt de temperatura de -10,3°C a -9,6°C. El resultat d'aquest disseny queda de la següent forma:

Taula 11.53.- Dades de disseny de la mitja canya

Paràmetres	CL-801	CL-802
Temperatura d'entrada (°C)	75,6	68,5
Calor a bescanviar (kJ/s)	-101,5	-10,6
Àrea de bescanvi tub (m2)	6,31	0,731
Velocitat (m/min)	87,8	61,1
Àrea de secció del tub (m2)	0,0039	0,0039
Radi del tub (m)	0,05	0,05
Diàmetre del tub (m)	0,1	0,1
Longitud tub (m)	63,1	7,31
1 volta (m)	5,10	2,60
nº voltes mitja canya	12,4	2,82
Alçada mitja canya (m)	1,24	0,282
Distància entre volta-volta (m)	0,04	0,1
Alçada final de la mitja canya (m)	1,73	0,563

Les fórmules emprades per a calcular les dimensions de la mitja canya són les següents:

$$Q_V = v \cdot A_{\frac{1}{2} \text{ canya}}$$

$$A_{\frac{1}{2} \text{ canya}} = \frac{\pi}{4 \cdot 2} \cdot D_{\frac{1}{2} \text{ canya}}^2$$

$$D_{\frac{1}{2} \text{ canya}} = \sqrt{\frac{Q_V \cdot 8}{v \cdot \pi}}$$

On:

- Q_V .- Cabal volumètric de refrigerant, m^3/s .
- $A_{1/2 \text{ canya}}$.- Àrea de pas de la mitja canya, m^2 .
- $D_{1/2 \text{ canya}}$.- Diàmetre de la mitja canya, m .
- v .- Velocitat de pas, 1- 3 m/s .

- **Disseny de l'agitador**

Els cristal·litzadors requereixen una agitació lenta (0,5rps) amb un agitador tipus àncora per tal d'evitar incrustacions a la cara interna de les parets del cristal·litzador.

D'acord amb la informació trobada a la bibliografia (Perry, 1999), el diàmetre d'aquest tipus d'agitador és el 90% del diàmetre del tanc. Així doncs, els diàmetres dels agitadors d'aquests cristal·litzadors prenen els valors de 1,46m i 0,74m respectivament. A més, a la mateixa bibliografia també es parla del nombre de potència que per a aquest agitador és igual a 2. Amb aquestes dades es calcula la potència necessària per a la correcta agitació de les mescles de cristal·lització:

Taula 11.54.- Potència dels agitadors

	Potència (W)
Cristal·litzador CL-801	2078
Cristal·litzador CL-802	69,5

11.5 DISSENY DE LA COLUMNA D'EXTRACCIÓ (C-501)

La columna d'extracció que s'utilitza a l'àrea A-500 té com a objectiu eliminar del corrent d'àcid sulfúric brut que s'obté del reactor de nitració (R-401/2/3) el 98% dels compostos aromàtics que conté.

Per a poder obtenir les dimensions de la columna es fa una simulació amb el programa HYSYS. Les dades que s'introdueixen són les de cabals màssics d'entrada a la columna d'extracció (nº 66 i 67 del diagrama de procés) i a continuació s'itera sobre el corrent de pentà que ha d'entrar per a arribar al 98% d'eliminació de compostos aromàtics.

Amb la simulació s'arriben a obtenir les següents dades:

Taula 11.55.- Dades d'entrada de corrents aquós i orgànic

Líquid ENTRADA	kg/batch	%
Àc. Sulfúric	10452,5565	65,7964
Àc. Nitrós	-	-
para-nitrofenol	93,9245	0,5912
orto-nitrofenol	0,1299	0,0008
dinitrophenol	0,6606	0,0042
Fenol	-	-
Àc. Nítric	57,0149	0,3589
Aigua	5265,9460	33,1479
By-products	15,9890	0,1006
TOTAL	15886,2215	100,0000
N-PENTÀ	2600,0000	

Aquí es veu que es necessiten 2600 kg de pentà per cada batch d'aigües mare que es produeixen a la nitració, és a dir, 3900 kg/h si es consideren els 36 batch/dia que s'han de produir. Amb aquesta simulació també s'obtenen les dades de cada etapa d'equilibri:

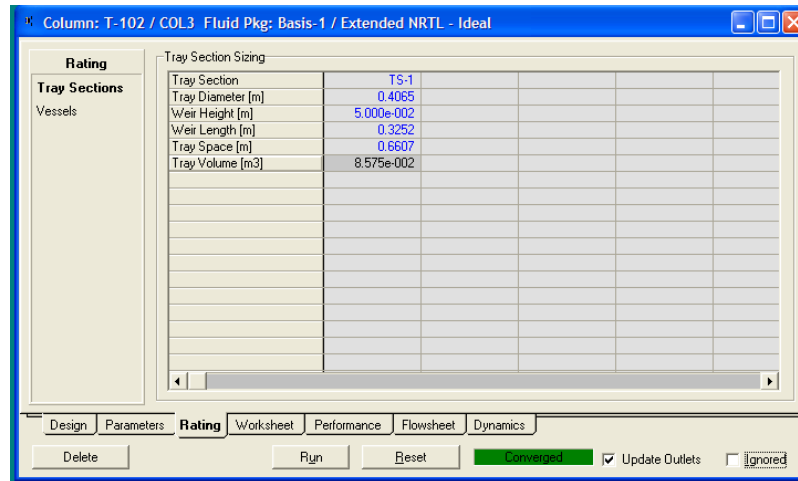


Figura 11.22.- Característiques de l'etapa d'equilibri

Un cop se sap el disseny d'un plat ja es poden saber les característiques del rebliment. Aquest rebliment ha de cobrir 3 alçades de plat ja que es necessiten 3 etapes d'equilibri. A la bibliografia (Sinnott R.K., 1983) s'ha trobat la Taula 11.56 a on s'hi troben els diferents tipus de rebliment, el material i algunes característiques. És d'aquí d'on s'ha seleccionat el rebliment que s'utilitzarà a la columna ("cadires Berl" Figura). A més, el material que funciona amb el pentà i el sulfúric és el tefló, per tant, serà aquest el material de recobriment interior de l'equip i també el del rebliment. La mida del rebliment es pot mirar a la Figura 11.23 i està en funció del diàmetre de l'equip, en aquest cas, $>0,3\text{m}$ però $<0,9\text{m}$.

Column diameter	Use packing size
$<0.3\text{ m}$ (1 ft)	$<25\text{ mm}$ (1 in.)
$0.3\text{ to }0.9\text{ m}$ (1 to 3 ft)	$25\text{ to }38\text{ mm}$ (1 to 1.5 in.)
$>0.9\text{ m}$	$50\text{ to }75\text{ mm}$ (2 to 3 in.)

Figura 11.23.- Taula de selecció de la mida del rebliment

Taula 11.56.- Característiques del rebliment en funció del tipus i mida

	Size		Bulk density (kg/m ³)	Surface area <i>a</i> (m ² /m ³)	Packing factor <i>F_p</i> m ⁻¹
	in.	mm			
Raschig rings ceramic	0.50	13	881	368	2100
	1.0	25	673	190	525
	1.5	38	689	128	310
	2.0	51	651	95	210
	3.0	76	561	69	120
Metal (density for carbon steel)	0.5	13	1201	417	980
	1.0	25	625	207	375
	1.5	38	785	141	270
	2.0	51	593	102	190
	3.0	76	400	72	105
Pall rings metal (density for carbon steel)	0.625	16	593	341	230
	1.0	25	481	210	160
	1.25	32	385	128	92
	2.0	51	353	102	66
	3.5	76	273	66	52
Plastics (density for polypropylene)	0.625	16	112	341	320
	1.0	25	88	207	170
	1.5	38	76	128	130
	2.0	51	68	102	82
	3.5	89	64	85	52
Intalox saddles ceramic	0.5	13	737	480	660
	1.0	25	673	253	300
	1.5	38	625	194	170
	2.0	51	609	108	130
	3.0	76	577		72

Les dimensions de la columna queden finalment de la següent forma:

Zona amb rebliment	
Diàmetre (m)	0,41
Alçada de rebliment (m)	1,98
Zones inferior i superior sense rebliment	
Diàmetre (m)	0,68
Alçada cilindre superior sense rebliment (m)	1,65
Alçada capçals semiesfèrics (m)	0,335
Alçada total (m)	5,96
Volum semiesfèrics (m ³)	0,0787
Volum total de l'equip (m ³)	1,9

Pel que fa als gruixos de l'equip, han estat calculats mitjançant la normativa ASME i en el seu defecte amb la bibliografia (Sinnott R.K., 1983). Els resultats d'aquests càlculs i les dimensions de l'equip es poden veure a la corresponent fulla d'especificacions del present projecte.

11.6 DISSENY DE LA COLUMNA D'ARRASTRE PER VAPOR (C-601)

- *Disseny funcional de la columna*

L'objectiu de la utilització d'aquesta columna és el de poder eliminar l'orto-nitrofenol i les impureses del para-nitrofenol que s'obtenen mitjançant la reacció de nitració. Aquesta purificació es realitza de forma que aquest producte quedi el més pur possible per a no tenir problemes de subproductes indesitjables a l'etapa de hidrogenació/acetilació posterior. Aquesta operació té com a objectiu el de evaporar una substància amb un punt d'ebullició molt alt a una temperatura més suau. En aquest cas, l'orto-nitrofenol entra a la columna a 80°C, per tant, està en fase líquida heterogènia. De la mateixa manera, la major part de les impureses també formen part de la fase líquida orgànica. El para-nitrofenol resta en solució en forma de suspensió aquosa, ja que té un punt de fusió molt més alt que el del orto-nitrofenol, i a més està parcialment dissolt. Per a que el vapor es pugui endur aquest compost és necessari que la mescla líquida es trobi a una temperatura inferior a 100°C (es troba a 93°C). A més, el cabal de vapor ha de ser tal que l'orto-nitrofenol es trobi a la fase vapor amb una pressió parcial igual a la pressió de vapor a aquella temperatura (Wankat, 1988). La pressió de vapor és, per tant, de 11,2mm de Hg, quedant la pressió parcial del vapor a la fase vapor igual a 748,8mm Hg. És aquesta la manera mitjançant la qual es desplaça aquesta substància a la fase vapor. D'altra banda, per a aconseguir que la mescla líquida augmenti la seva temperatura i que la massa d'orto-nitrofenol que volem eliminar passi a la fase vapor, el vapor ha de presentar un salt tèrmic concret a més de patir una petita condensació que fa augmentar la quantitat d'aigua de la mescla líquida. A continuació es representen clarament els càlculs realitzats per a dissenyar la columna d'arrastre per vapor.

- Càlcul del cabal de vapor necessari per a eliminar l'orto-nitrofenol i els by-products de la nitració

$$\left(0,509 \frac{\text{kmol by - products}}{h} + 0,0472 \frac{\text{kmol o - np}}{h} \right) \cdot \frac{748,8 \text{ kmol vapor}}{11,2 \text{ kmol o - np}} = 37,08 \frac{\text{kmol vapor}}{h}$$

$$37,08 \frac{\text{kmol vapor}}{h} \cdot \frac{18 \text{ kg}}{1 \text{ kmol}} \cdot (1 + 0,06) = 707,8 \frac{\text{kg vapor}}{h}$$

Mitjançant un procés iteratiu es troba que, per a que es compleixi el salt tèrmic que volem (5°C), s'ha de condensar un 6% del vapor que entra aleshores aquest s'afegeix al corrent d'entrada de vapor per a que es mantinguin les condicions establertes inicialment.

El volum i dimensions de la columna també es poden calcular. El temps de residència fixat és de 60 minuts ja que la operació es realitza en condicions suaus i lentes per a arrossegar l'orto-nitrofenol quantitativament sense haver de perdre gaire producte (p-nitrofenol). El volum i dimensions de la columna són els següents:

$$V_{líquid} = Q_{sortida} \cdot \tau = \frac{1,79 \text{ m}^3}{h} \cdot \frac{1}{60 \text{ min}} \cdot 60 \text{ min} = 1,79 \text{ m}^3$$

Com que el reactor es dissenya amb fons pla i capçal semiesfèrics la relació alçada de líquid/diàmetre que es fa servir és de 2,5.

$$H_{líquid} = 2,5 \cdot D_{columna}$$

$$V_{líquid} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{columna}^2 \cdot H_{líquid} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{columna}^2 \cdot 2,5 \cdot D_{columna} = \frac{2,5 \cdot \pi}{4} \cdot D_{columna}^3$$

$$D_{columna} = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot V_{líquid}}{2,5 \cdot \pi}} = 0,97 \text{ m} \quad H_{líquid} = 2,5 \cdot D_{columna} = 2,43 \text{ m}$$

on:

- $H_{líquid}$.- alçada aproximada de líquid a dintre de la columna, m
- $D_{reactor}$.- diàmetre la columna, m
- $V_{líquid}$.- volum de líquid a dintre de la columna, m^3

A partir d'aquesta alçada de líquid es fa un sobredimensionament i s'obtenen la resta de mides:

$$H_{cilindre} = H_{líquid \text{ cilindre}} \cdot 1,35 = 3,28 \text{ m}$$

$$V_{cilindre} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{reactor}^2 \cdot H_{cilindre} = 2,429 \text{ m}^3$$

$$H_{columna} = H_{cilindre} + 2 \cdot H_{semiesfèric} = 4,26 \text{ m}$$

on:

- H_{reactor} .- alçada total de la columna, m
- $H_{\text{cos cilíndric}}$.- alçada de la part cilíndrica de la columna, m

- **Balanç d'energia de la columna**

Per a saber la temperatura a la que ha de sortir i entrar el vapor d'aigua es realitza un balanç energètic de la columna. Es busca un salt tèrmic que no sigui molt més gran de 5°C i que compleixi una temperatura de sortida de 115°C. Amb aquestes restriccions i el cabal necessari de vapor per a arrossegar l'orto-nitrofenol i els by-products de la nitració es pot resoldre el balanç energètic.

$$\begin{aligned} & \sum m_{\text{entrada}} \cdot C_{pm} \cdot (T_2 - T_1) + m_{\text{orto vapor}} \cdot (C_{pm,o} \cdot (T_{\text{sortida vapor}} - T_2) + \Delta H_{\text{vap,o}}) + \\ & + m_{\text{byproducts vapor}} \cdot (C_{pm,b} \cdot (T_{\text{sortida vapor}} - T_2) + \Delta H_{\text{vap,b}}) = m_{\text{vapor}} \cdot C_{p,\text{vapor}} \cdot (T_{\text{sortida}} - T_{\text{entrada}}) + \\ & + m_{\text{vapor condensat}} \cdot \lambda_{\text{vapor}} \rightarrow T_{\text{entrada}} = 120,6^\circ \text{C} \end{aligned}$$

on:

- m_{entrada} .- cabal màssic de la dissolució d'entrada a la columna (35,8kg/min)
- C_{pm} .- calor específic de la mescla (109,5kJ/kmol K)
- T_2 .- temperatura d'arrestre (93 °C)
- T_1 .- temperatura d'entrada de les dissolucions (80 °C)
- $m_{\text{orto vapor}}$.- cabal màssic de l'orto-nitrofenol arrossegat (0,1083kg/min)
- $C_{pm,o}$.- calor específic de l'ortonitrofenol (1,035kJ/kg K)
- $T_{\text{sortida vapor}}$.- temperatura de sortida del vapor (115°C)
- $\Delta H_{\text{vap,o}}$.- entalpia d'evaporació de l'orto-nitrofenol (359,4kJ/kg)
- $m_{\text{byproducts}}$.- cabal màssic de byproducts arrossegat (0,7907kg/min)
- $C_{pm,b}$.- calor específic dels byproducts (1,354kJ/kg K)
- $\Delta H_{\text{vap,b}}$.- entalpia d'evaporació dels byproducts (601,2kJ/kg)
- m_{vapor} .- cabal màssic de vapor d'entrada (11,8kg/min)
- $C_{p,\text{vapor}}$.- calor específic del vapor (2,1kJ/kg K)
- λ_{vapor} .- calor latent del vapor (2260kJ/kg)

Amb aquest balanç ja se sap que la temperatura a la que ha d'entrar el vapor a la columna és de 120,6°C. Aquest vapor entrarà pel capçal inferior semiesfèric i passarà a través d'una placa plana foradada que farà de repartidora de vapor. A l'apartat de disseny mecànic de la columna es poden veure més detalladament els càlculs del dimensionament de la columna i de la placa difusora.

- **Disseny mecànic de la columna**

El disseny funcional del reactor va seguit del disseny mecànic del mateix. Aquest últim té com a objectiu garantir la seguretat física d'operació mitjançant l'ajust de formes i gruixos de totes les parts de l'equip. Aquest disseny es realitza seguint la normativa ASME, tot i que, per a establir els gruixos mínims de cilindres i capçals, s'aplicaran els valors de la Figura 11.1 on ja es troben inclosos 2 mm de tolerància a la corrosió.

- **Cos cilíndric**

L'equació que s'aplica per a calcular el gruix del cos del reactor ($t_{cilindre}$) per pressió interna és la següent:

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

on:

- P .- pressió de disseny, atm
- R .- radi intern del cilindre, mm
- E .- factor de soldadura
- S .- límit elàstic del material de construcció, atm
- C_1 .- tolerància a la corrosió, mm
- C_2 .- tolerància a la fabricació, mm

El primer que es mira a l'hora d'aplicar l'equació és la pressió de disseny. Aquesta serà el producte d'un sobredimensionament (30%) de la pressió a la que es vol normalment operar:

$$P \text{ (atm)} = \left(P_{op} + \rho g H_l \cdot \frac{1}{101325 \frac{N}{m^2}} \right) \cdot 1,3 = 2,53 \text{ atm}$$

on:

- P_{op} .- pressió d'operació (1,7atm)
- g .- gravetat (9,81m/s²)
- H_L .- alçada de la columna de líquid (2,43 m)
- ρ .- densitat de la mescla de reacció (1050 kg/m³)

La temperatura a la que es treballa també es té en compte ja que el límit elàstic dels materials depenen d'aquesta. El sobredimensionament que es fa és del 15%. Així, el límit elàstic que s'empra ha de poder suportar una temperatura de 138,7°C. Per a escollir el valor d'aquest límit es fa servir la Taula 11.2 del present manual de càlcul. El valor que pren el límit elàstic per a un AISI304 és de 1300atm.

Pel que fa el factor de soldadura, s'escull un valor de 0,85. Aquest correspon a una soldadura amb radiografiat parcial. La tolerància a la corrosió que s'aplica és de 1,5 mm perquè no tenim components àcids. La tolerància a la fabricació és de 1 mm.

Amb tot aquest conjunt de dades ja es pot aplicar l'equació inicial per a obtenir el gruix del cos del reactor. El resultat que se n'obté de fer els càlculs és de 3,61mm. Com que el reactor fa menys d'un metre de diàmetre s'escull un gruix mínim de 5mm segons la Figura 11.1 de gruixos mínims en funció del diàmetre del recipient.

o **Capçals semiesfèrics**

Per a determinar el gruix d'aquest tipus de capçal es fa servir la següent equació de la normativa ASME:

$$t = \frac{PR}{2SE - 0,2P} + C_1 + C_2$$

on:

- P .- pressió de disseny, atm
- R .- radi de l'esfera = radi del cilindre (485,2mm)
- E .- factor de soldadura (0,85)
- S .- límit elàstic del material de construcció (1300 atm)
- C_1 .- tolerància a la corrosió, mm
- C_2 .- tolerància a la fabricació, mm

Aquesta pressió de disseny varia degut a que hi ha dos capçals i tots dos suporten una pressió diferent a la del cos del reactor. En el cas del capçal superior, la pressió de disseny és la pressió de operació sobredimensionada en un 30%, és a dir, 2,2atm. Pel que fa al capçal inferior, la pressió de disseny és aquella a la que arriba el vapor a la columna (que per a 120,6°C serà de 2atm) sobredimensionada un 50%, és a dir, 3atm.

Aplicant l'equació del gruix per capçals semiesfèrics s'obtenen els següents gruixos:

$$t_{\text{capçal superior}} = \frac{2,2\text{atm} \cdot 485,2\text{mm}}{2 \cdot 1300 \cdot 0,85 - 0,2 \cdot 2,2} + C_1 + C_2 = 2,98\text{mm} \rightarrow 5\text{mm}$$

$$t_{\text{capçal inferior}} = \frac{3\text{atm} \cdot 485,2\text{mm}}{2 \cdot 1300 \cdot 0,85 - 0,2 \cdot 3\text{atm}} + C_1 + C_2 = 3,16\text{mm} \rightarrow 5\text{mm}$$

El gruix del capçal inferior s'arrodoneix a un gruix de 5mm perquè el gruix del capçal inferior ha de ser com a mínim igual o superior a aquell que s'utilitza pel cos del recipient, és a dir, 5mm.

o Càlcul del pes del reactor

El pes de qualsevol recipient es calcula sempre de la mateixa manera. Primerament, mitjançant els gruixos de cadascuna de les parts del reactor, es calcula el volum de material que es fa servir. Posteriorment es multiplica aquest volum per la densitat del material del que anirà construït l'equip.

- Pes d'acer del cilindre (Pes_{acer cilindre})

$$Pes_{\text{acer cilindre}} = \frac{\pi}{4} \cdot \left[\left(D_{\text{reactor}} + \frac{2 \cdot t_{\text{cilindre}}}{1000} \right)^2 - D_{\text{reactor}}^2 \right] \cdot H_{\text{cilindre}} \cdot \rho_{\text{acer}} = 397,8\text{kg}$$

- Pes d'acer dels capçals

$$Pes_{acer\ capçal} = \left(V_{semiesfèric\ exterior} - V_{semiesfèric\ interior} \right) \cdot \rho_{acer}$$

$$Pes_{acer\ capçal} = \left(\frac{4}{6} \cdot \pi \cdot R_{ext}^3 - \frac{4}{6} \cdot \pi \cdot R_{int}^3 \right) \cdot \rho_{acer}$$

$$R_{ext}^3 = \left(R_{reactor} + t_{capçal} \right)^3$$

on:

- $V_{torisfèric}$.- volum del capçal semiesfèric
- $R_{semiesfèric\ interior} = R_{reactor}$
- $\rho_{acer} = 7900\ kg/m^3$

En aquest cas el $R_{semiesfèric\ exterior}$ serà igual per a un capçal i per l'altre, tenint en compte que tots dos fan 5mm. El pes de tots dos capçals és de 238,6kg.

- Pes de l'equip

El pes total de l'equip buit és aquell que s'obté de sumar el pes de totes les parts de l'equip, és a dir, cos i capçals. Aquest pren un valor de 636,5kg d'acer AISI304.

“Pes de l'equip buit = pes del cilindre + pes del capçal superior + pes del capçal inferior”

Quan l'equip està ple, s'ha d'afegir al pes de l'equip buit aquell pes que prové del producte entre el volum de líquid que hi a dintre del reactor i la seva densitat

“Pes de l'equip ple = pes de l'equip buit + $V_{equip} \cdot \rho_{fluid\ en\ operació}$ ”

El pes de l'equip ple ha de considerar la densitat de l'aigua si el fluid que ha de contenir té una densitat inferior a aquesta. Això és degut a que a la posta en marxa s'utilitzarà aigua per a fer la comprovació de les estanqueïtats dels equips. Com que aquest no és el cas, el pes es calcula amb la densitat del fluid en operació. El pes final, amb el reactor ple, és de 3189kg.

- **Disseny de la placa perforada**

La placa que difon el vapor en el sí del líquid té un gruix de 6mm ja que la seva resistència, en estar perforada, és menor que si fos un fons pla d'un recipient qualsevol. El percentatge d'àrea perforada entre l'àrea total de la placa es pot saber mitjançant la següent gràfica:

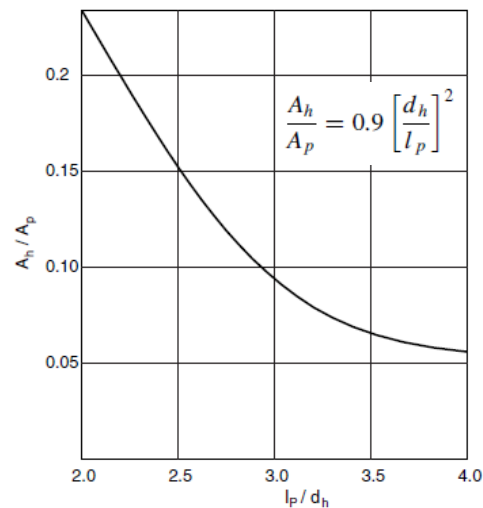


Figura 11.24.- Relació entre l'àrea perforada i l'àrea de forat

on:

- A_h .- àrea total de pas de vapor, m^2
- A_p .- àrea perforada, m^2
- d_h .- diàmetre de forat ($stdnd=0,005m$)
- l_p .- distància entre dos centres de forat ($l_p=0,025m$)

Amb la gràfica i les dades de que disposem es pot saber que l'àrea total de pas del vapor és de $0,057m^2$ ja que la relació A_h/A_p s'ha de trobar entre 0,06 i 0,25. (Figura 11.24)

Per a fer el càlcul del nombre de forats que hi haurà a la placa només cal dividir l'àrea total perforada entre l'àrea d'un forat:

$$n^{\circ} \text{ forats} = \frac{A_h}{A_{\text{forat}}} = \frac{0,057m^2}{\pi \cdot r_{\text{forat}}^2} = 104 \text{ forats}$$

La caiguda de pressió a través de la placa foradada es calcula de la següent forma:

$$u_0 = \frac{\text{Cabal de vapor}}{n^{\circ} \text{ forats} \cdot A_{\text{forat}}} = 22 \frac{m}{s}$$

$$h_d = 51 \left(\frac{u_0}{C_0} \right)^2 \left(\frac{\rho_v}{\rho_L} \right) = 33mm H_2O$$

on:

- h_d .- pèrdua de càrrega, mm d'aigua
- u_0 .- velocitat del vapor a través de l'orifici, 22m/s
- C_0 .- coeficient de l'orifici, 0,92
- ρ_v, ρ_L .- densitats del vapor i del líquid respectivament, kg/m^3

El coeficient de l'orifici (C_0) es calcula mitjançant la següent Figura 11.25. La velocitat del vapor a través de l'orifici és de 22m/s coincidint amb la velocitat típica bibliogràfica (McCabe, 2001). Aquesta pèrdua de càrrega (298,5Pa) traduïda a atmosferes és negligible en comparació amb les pressions necessàries a la columna d'arrastre. A més, el salt tèrmic considerat a través de la columna (5°C) té en compte la pèrdua de càrrega a través de la columna de líquid i se sobredimensiona en 0,5°C més que donaran pressió suficient per a passar a través del plat i de la columna de líquid que hi ha a sobre.

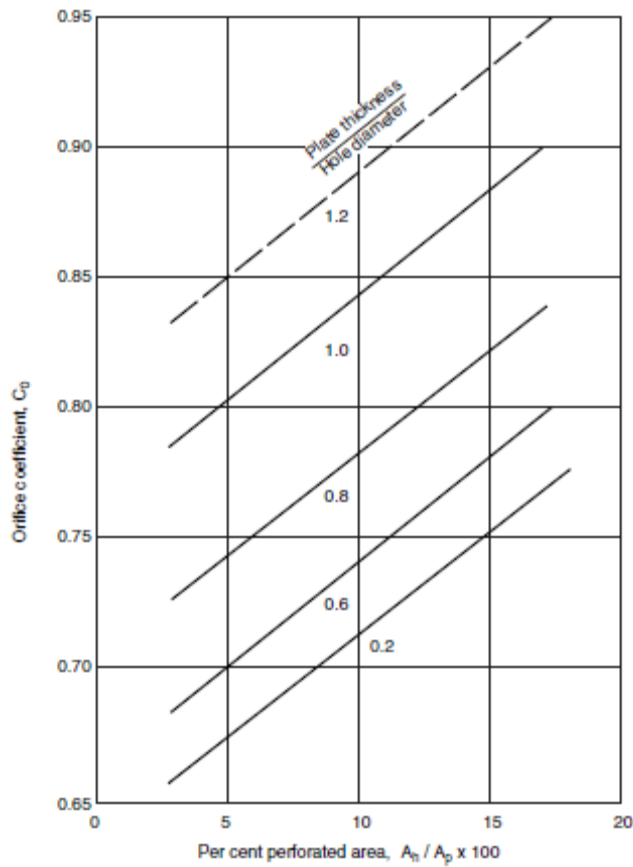


Figura 11.25.- Coeficient d'orifici en funció del percentatge d'àrea perforada

- **Disseny de l'agitador**

L'agitador d'aquesta columna haurà de mantenir una suspensió totalment homogènia a dintre de la columna per a evitar que els forats de la placa per on entra el vapor es taponin. A més d'això, s'ha de tenir en compte que hi ha un 50% de sòlids a la dissolució i que, per tant, la velocitat de gir de l'agitador vindrà determinada per l'equació de zwietering (McCabe, 2001):

$$n_c D_a^{0,85} = S v^{0,1} D_p^{0,2} \left(g \frac{\Delta \rho}{\rho} \right)^{0,45} B^{0,13}$$

on:

- n_c .- velocitat crítica de l'agitador, rps
- D_a .- diàmetre de l'agitador, m
- S .- factor de forma
- ν .- viscositat cinemàtica, m^2/s
- D_p .- diàmetre mig de la partícula, m
- g .- gravetat, m^2/s
- $\Delta\rho$.-diferència de densitat entre el sòlid i el líquid, kg/m^3
- ρ .- densitat del líquid, kg/m^3
- B .- 100xpes del sòlid/pes del líquid

Aquestes dades necessàries per a aplicar l'equació s'obtenen de diferents fonts. La viscositat cinemàtica, per exemple, s'obté del paquet de propietats del simulador HYSYS i pren el valor de $5,05E-07 m^2/s$. El diàmetre mig de la partícula és de $150\mu m$ i la relació entre la diferència de densitat/densitat del líquid és de 0,49. D'altra banda, l'agitador que s'escull és el de turbina de sis pales perquè és un dels més indicats per a mantenir sòlids en suspensió de forma homogènia. De la taula que es presenta a continuació es poden obtenir la resta de dades que falten com la relació entre el diàmetre del recipient i el de l'agitador i el factor de forma.

Taula 11.57.- Factor de forma per a l'equació de Zwietering

Impeller type	D_i/D_a	D_i/E	S
Six-blade turbine	2	4	4.1
$D_a/W = 5$	3	4	7.5
$N_p = 6.2$	4	4	11.5
Two-blade paddle	2	4	4.8
$D_a/W = 4$	3	4	8
$N_p = 2.5$	4	4	12.5
Three-blade propeller	3	4	6.5
$N_p = 0.5$	4	4	8.5
	4	2.5	9.5

Finalment la velocitat de gir de l'agitador haurà de ser la següent:

$$n_c = \frac{S_v^{0,1} D_p^{0,2} \left(g \frac{\Delta\rho}{\rho} \right)^{0,45} B^{0,13}}{D_a^{0,85}} = 2,9 rps = 174 rpm$$

Com que l'únic que es busca amb aquest agitador es mantenir la zona que es troba just per sobre de la placa difusora amb agitació completa, es faran servir dues turbines tal i com es fa al tanc pulmó de p-nitrofenol (T-401).

o **Càlcul de la potència de l'agitador**

La potència de l'agitador quan el que es vol aconseguir és una suspensió de sòlids homogènia ve determinada per diferents correlacions empíriques que estan calculades en funció del diàmetre del recipient. A la Figura 11.26 s'hi representen aquestes correlacions gràficament retornant el valor de la relació Potència/volum de líquid en unitats de hp/1000gal. Quan es fa la interpolació del diàmetre de la columna d'arrastre (31,84ft) a la gràfica la única línia que es pot fer servir és la de Buurman que pren un valor de P/V igual a 2,1:

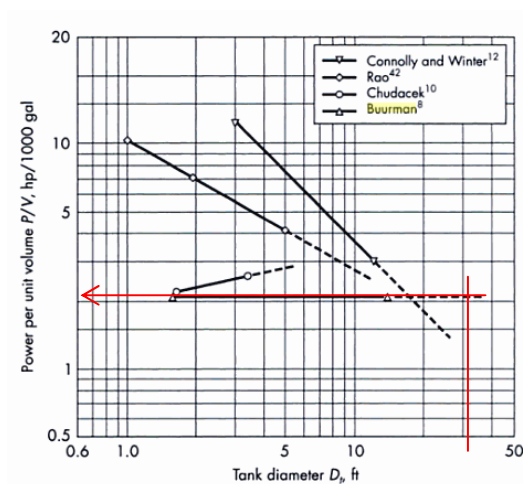


Figura 11.26.- Potència requerida per a la suspensió completa de sòlids

Com que el volum de líquid a la columna és de 394,8 gallons ($1,79\text{m}^3$), la potència requerida per a una turbina de pales és la següent:

$$\frac{P}{V} = 2,1 \frac{\text{hp}}{1000 \text{ gal}} \rightarrow P = 2,1 \cdot 394,8 \text{ gal} = 0,829 \text{ hp} = 618,2 \text{ watts}$$

Com que a la bibliografia (Sinnott R.K., 1983) s'ha trobat que la potència, quan hi ha dues turbines al mateix agitador, és 1,9 vegades la potència d'una sola turbina i que a més, el fet que hi circuli un flux en estat vapor fa disminuir la potència requerida un 40%, doncs la potència final és de 0,7kW.

○ **Dimensionament de l'agitador**

L'agitador es dimensiona segons un disseny estàndard de turbina. Així, per norma general, el reactor tindrà 4 bafles per a evitar que es formi un vòrtex al líquid que l'únic que provocaria és un empitjorament de la operació del reactor. El diàmetre de turbina és 1/3 del diàmetre del recipient en aquest cas (0,32m) i l'alçada de la turbina és de ¼ el diàmetre de la turbina (0,081m).

11.7 DISSENY DELS TANCS PULMÓ

11.7.1 Disseny del tanc pulmó de para-nitrofenol (T-401)

- **Disseny funcional**

El tanc pulmó del para-nitrofenol té la utilitat de separar el procés de nitració, que està seqüencialitzat però no deixa de ser un procés discontinu, del procés de purificació del para-nitrofenol que treballa de forma contínua. Aquest tanc pulmó es dissenya per a absorbir les variacions de producció anteriors a la purificació. Això és degut a que l'arribada de para-nitrofenol no és contínua sinó que arriba puntualment cada 40 minuts ($t_{\text{seqüencialització}}$) i, d'altra banda, el que sí arriba contínuament és el producte recuperat de les aigües mare del reactor de nitració. Aquest tanc pulmó es troba a una temperatura constant de 50°C per a fer que el para-nitrofenol es trobi més dissolt i també perquè sigui la dissolució sigui molt menys viscosa.

La capacitat calculada per a aquest tanc és la següent:

$$\text{Volum d'un batch (m}^3\text{)} = 1,02 \text{ m}^3 \text{ de dissolució de p-nitrofenol (50\%)}$$

$$\text{Volum total (m}^3\text{)} = V_{\text{batch}} \cdot 6 \cdot 1,15 = 7,015 \text{ m}^3 \text{ TOTALS}$$

$$\frac{H_{cilindre}}{D_{tan c}} = 1,2 \rightarrow V_{total} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{tan c}^2 \cdot H_{cilindre} \rightarrow D_{tan c} = \sqrt[3]{\frac{4 \cdot V_{total}}{1,2 \cdot \pi}} = 1,86m$$

$$H_{cilindre} = 1,2 \cdot D_{tan c} = 2,38m \rightarrow V_{capçal torisfèric} = 0,0809 \cdot D_{int}^3 = 0,523m^3$$

- **Disseny mecànic del tanc**

El tanc es dissenya exactament igual que la resta d'equips. Primerament es miren les pressions que ha de suportar el recipient i seguidament s'apliquen les fórmules de la normativa ASME per a obtenir el gruix de cadascuna de les parts de l'equip o en el seu defecte es miraran els gruixos mínims en funció del diàmetre del recipient que es troben a la Figura 11.1 del present manual de càlcul. Els resultats que es presenten a continuació són els que s'han obtingut seguint aquesta metodologia:

Taula 11.58.- Característiques físiques del tanc pulmó de p-nitrofenol

Paràmetres	Valors
Gruix de la part cilíndrica (mm)	6
Gruix del fons pla (mm)	8
Gruix del capçal torisfèric (mm)	5
Pes de l'equip buit (kg)	727
Pes de l'equip amb fluid d'operació (kg)	8316
Material	Acer AISI304

- **Disseny de l'agitador**

L'agitador d'aquest tanc pulmó es dissenya amb el mateix mètode de càlcul que s'ha emprat per a dissenyar l'agitador de la columna d'arrastre per vapor (C-601). La única diferència amb aquest és que no es pot considerar el 60% de la potència ja que al tanc pulmó no entra cap tipus de corrent en estat vapor o gas. La potència requerida d'agitació és per tant de 1,17kW.

- **Balanç d'energia i disseny del sistema de bescanvi de calor**

Aquest tanc pulmó s'ha de mantenir a una temperatura de 50°C de manera que li serà incorporat un bon aïllant (per no perdre calor i també per seguretat) i un serpentí que mantingui aquesta temperatura. L'aïllant es busca mitjançant el programa informàtic Induver . Aquest programa, que està a disposició de tothom, calcula a partir de dades com alçada de la paret cilíndrica, temperatura interior, temperatura exterior,...etc. les pèrdues i l'aïllant que ha de portar aquell recipient. En aquest cas, s'ha escollit una xapa pintada i 30mm d'aïllant BX SPINTEX 613/40 i, tot i així, les pèrdues que hi ha a través de les parets són de 54w/m² de superfície lateral.

A part d'això, el serpentí ha de tenir capacitat per a escalfar els corrents d'entrada fins a 50°C. Aquest calor es pot calcular mitjançant el següent balanç energètic:

$$m_{\text{corrent 24}} \cdot C_{pm} \cdot (T - T_{\text{corrent 24}}) + m_{\text{corrent 26}} \cdot C_{pm} \cdot (T - T_{\text{corrent 26}}) + Q_{\text{perdut}} = Q_{\text{serpentí}}$$

$$Q_{\text{serpentí}} = 45,22 \text{kJ} / \text{s} + 0,054 \text{kW} / \text{m}^2 \cdot 13 \text{m}^2 = 45,9 \text{kJ} / \text{s}$$

on:

- C_{pm} .- calor específic del corrent, kJ/kgK
- $T_{\text{corrent 24}}$.- temperatura del corrent n°24 (20°C)
- $T_{\text{corrent 26}}$.- temperatura del corrent n°26 (80°C)
- Q_{perdut} .- calor perdut a través de les parets del recipient (54W/m²)

El calor calculat a partir del balanç d'energia és el que ha de ser capaç de aportar el serpentí mitjançant un fluid a alta temperatura. En aquest cas es fa servir aigua a 70°C procedent d'una altra operació de bescanvi de calor. El salt tèrmic de l'aigua és de 10°C i les dimensions del serpentí que compleix amb aquestes especificacions són les següents:

Taula 11.59.- Especificacions del serpentí

Àrea de bescanvi tub (m)	3,939407
Velocitat típica (m/min)	72
Secció	0,0006605
Radi del tub (m)	0,01449974
Diàmetre del tub (m)	0,02899948
Longitud del tub (m)	43,2405023
Longitud d'una volta (m)	5,22500991
nº voltes serpentí	8,27567852
Alçada del serpentí (m)	0,23999039
Volum del serpentí (m3)	0,02856019
Distància entre volta-volta (m)	0,02899948
Alçada+distància entre volta	0,47998079

El cabal d'aigua que passa pel serpentí per a complir les especificacions anteriors és de $2,85\text{m}^3/\text{h}$, sortint a una temperatura de 60°C i tornant a la zona de serveis per a produir vapor a la resta de la planta.

11.7.2 Disseny del tanc d'emmagatzematge de NO_x (T-302)

- **Disseny funcional**

Per a poder dur a terme una de les principals reaccions de la planta, la nitració, és necessari disposar d'àcid nítric en dissolució. Aquest àcid és molt inestable i en solució, a 25°C i 1atm, es descomposa ràpidament a $\text{NO}_{(g)}$, $\text{NO}_{2(g)}$ i aigua. Aquest gasos que es formen s'han de recircular perquè sinó s'estaria perdent un dels reactius principals. Aquesta recirculació s'aconsegueix amb la compressió adiabàtica del gas i el posterior emmagatzematge d'aquest a un tanc pulmó que subministrarà els òxids de nitrogen al reactor R-301 per a obtenir una altra vegada àcid nítric.

El tanc pulmó de NO_x ha de tenir capacitat com per a emmagatzemar els NO_x necessaris d'entrada al reactor R-301 durant 15 minuts. Aquest temps és l'interval en el que no es produeixen NO_x a cap dels reactors de nitració ja que aquests són seqüencials i produeixen els gasos de forma discontinua. A part d'aquesta recirculació, també hi ha una aportació de gasos de nitrogen des del reactor R-302, per tant, el dimensionament del tanc d'emmagatzematge es realitza de la següent manera:

$$V_{\text{tan c}} = V_{\text{NO}_x} (\text{1batch})$$

$$nRT = \left[P + \frac{n^2 a}{V^2} \right] [V - nb] \rightarrow V_{\text{tan c}} = 43,7 \text{ m}^3 = \frac{4}{3} \pi R^3 \rightarrow R \approx 2,2 \text{ m}$$

on:

- *a, b.* - constants de Van del Waals per a gasos reals
- *V.* - volum que ocupen els mols de gas d'un batch (5,49kmol de NO i 5,49kmol de NO₂), m³
- *P.* - pressió a la que s'emmagatzema el gas (7atm)
- *n.* - n° de mols que es vol emmagatzemar
- *T.* - temperatura del tanc (70°C)

Com es pot veure, el tanc pulmó té capacitat per a emmagatzemar el volum d'òxids de nitrogen que es necessiten per a un batch i les seves dimensions es calculen tenint en compte que és de forma esfèrica. Amb aquesta equació per al càlcul del volum d'un gas real es tenen en compte les desviacions que puguin tenir els gasos en condicions diferents a les habituals.

- **Compressió adiabàtica**

Els òxids de nitrogen s'emmagatzemen comprimits en un tanc a una pressió superior a la pressió atmosfèrica. Aquesta pressió és necessària perquè hauran de ser injectats a un reactor que treballa a 5 atm però també perquè si no estiguessin sotmesos a pressió ocuparien molt més volum del que ocupen a una pressió més elevada.

Aquesta compressió i el posterior emmagatzematge són problemàtics en el sentit que el diòxid de nitrogen és un gas fàcilment condensable i que l'objectiu de l'emmagatzematge no és el de liquar els gas, sinó que és el de mantenir els òxids de nitrogen en la mateixa proporció molar i en estat gasós. Per tal de complir amb aquestes condicions s'empra l'equilibri líquid-gas del NO₂ que es pot veure a la Figura 11.27.

Mitjançant aquesta gràfica d'equilibri es decideix treballar a una pressió de 7atm i una temperatura de 70°C (342K). En aquestes condicions el diòxid de nitrogen està en estat gasós i, per tant, no donarà problemes de formació de condensats a l'emmagatzematge.

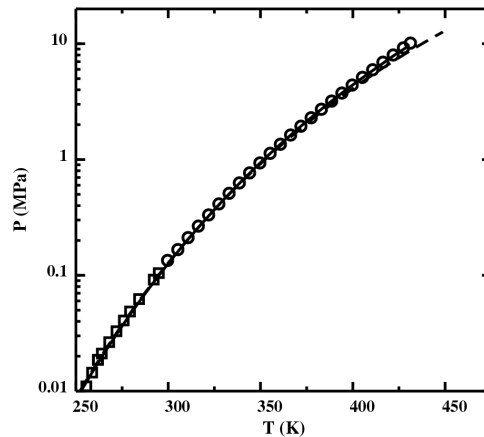


Figura 11.27.- Diagrama d'equilibri líquid-gas del NO₂

La compressió adiabàtica haurà de tenir una potència suficient com per a portar els gasos de nitrogen des d'una temperatura de 25°C i pressió atmosfèrica fins a una temperatura de 70°C i 7atm de pressió. Per a calcular la potència necessària que ha de proporcionar el compressor primer s'ha de saber el rendiment d'aquest. El càlcul del rendiment es realitza mitjançant la següent equació:

$$\eta = \frac{\left[\frac{P_b}{P_a} \right]^{\frac{2}{7}} - 1}{\left[\frac{T_2}{T_1} \right] - 1} = \frac{\left[\frac{7}{1} \right]^{\frac{2}{7}} - 1}{\left[\frac{(70 + 273)}{(25 + 273)} \right] - 1} = 0,64$$

on:

- T_2 .- temperatura del gas a la sortida del compressor (70 °C)
- T_1 .- temperatura del gas a l'entrada del compressor (25 °C)
- P_b/P_a .- relació de compressió entre pressió a la sortida i a l'entrada del compressor

El rendiment que resulta d'aquesta compressió és del 68%. Amb aquest rendiment es pot saber la potència necessària que ha de tenir el compressor per a les especificacions donades. El càlcul es detalla a continuació:

$$\bar{W} = \frac{\gamma}{(\gamma - 1) \cdot \eta} \cdot \frac{zRT}{PM} \left[\left(\frac{P_b}{P_a} \right)^{1-\frac{1}{\gamma}} - 1 \right] = \frac{1,29}{(1,29 - 1) \cdot 0,64} \cdot \frac{1 \cdot 8,314 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} \cdot (25 + 273)\text{K}}{\left(0,5 \cdot 30 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}} + 0,5 \cdot 46 \frac{\text{kg}}{\text{kmol}}\right)} \left[\left(\frac{7}{1} \right)^{1-\frac{1}{1,29}} - 1 \right] = 158,6 \frac{\text{kJ}}{\text{kg}}$$

on:

- T .- temperatura d'entrada del gas (25°C)
- γ .- relació dels calors específics ($C_p/C_v=1,29$)
- P_b/P_a .- relació de compressió entre pressió a la sortida i a l'entrada del compressor
- z .- factor de compressibilitat del gas
- R .- constant dels gasos (8,314kJ/kmol)
- PM .- pes molecular del gas (NO+NO₂ al 50%)
- W .- potència del compressor per unitat màssica (kJ/kg)

Amb la potència màssica del reactor i el cabal màssic que ha de comprimir es pot saber la potència final de l'equip:

$$W = \bar{W} \cdot Q_{\text{màssic}} = 158,6 \text{ kJ/kg} \cdot 0,249 \text{ kg/s} = 61,6 \text{ kW}$$

- **Disseny mecànic**

- **Gruix de la paret del tanc esfèric**

El tanc ha d'aguantar 7atm a més del pes del fluid que hi ha a l'interior i d'un sobredimensionament del 30%, això significa que ha d'aguantar 10,5atm.

Degut a la incompatibilitat d'aquest tipus de gasos amb la majoria de materials, es decideix construir el tanc d'acer inoxidable AISI304 (material de suport) amb recobrint teflonat interior que aguanta fins a 200°C. El límit elàstic de l'acer AISI304 a una temperatura de 78°C (70°C+15%) és de 1450atm.

El gruix del recipient es calcula a partir de la següent equació (normativa ASME):

$$t = \frac{P \cdot R}{2 \cdot S \cdot E - 0,2 \cdot P} + C_1 + C_2$$

$$t = \frac{10,5 \text{ atm} \cdot 2200 \text{ mm}}{2 \cdot 1450 \text{ atm} \cdot 0,85 - 0,2 \cdot 10,5} + 2 \text{ mm} + 1 \text{ mm} = 12,3 \text{ mm} \rightarrow 12 \text{ mm}$$

on:

- *P*.- pressió de disseny, atm
- *R*.- radi de l'esfera, mm
- *E*.- factor de soldadura (0,85)
- *S*.- límit elàstic del material de construcció (1450 atm)
- *C*₁.- tolerància a la corrosió, mm
- *C*₂.- tolerància a la fabricació, mm

○ **Càlcul del pes de l'equip**

El pes de l'equip es calcularà de la mateixa forma que s'han calculat els pesos dels equips anteriors, és a dir, calculant la diferència entre el volum extern i el volum intern del recipient i multiplicar-la per la densitat del material. El pes total de l'equip buit és de 5685,4 kg d'acer i el pes de l'equip ple pren un valor de 6102,6 kg.

11.8 DISSENY D'ASSECADORS (AR-601, AB-801, AB-802)

11.8.1 Disseny de l'assecador rotatori AR-601

L'assecador rotatori es dissenya per a poder eliminar una part de l'aigua que conté el para-nitrofenol a l'etapa de purificació. Aquesta operació es realitza mitjançant un assecador rotatori que consta de dues entrades: nitrogen calent i para-nitrofenol al 30% d'humitat. El sòlid de sortida ha de tenir una fracció màssica d'aigua (*X*_b) de 0,11 lb aigua/lb totals de sòlid. A continuació s'especifica el procés de càlcul que s'ha seguit per a obtenir les dimensions i condicions d'operació de l'equip.

- **Disseny funcional de l'assecador**

El corrent d'entrada de para-nitrofenol té la següent composició

Taula.11.60.- Composició de para-nitrofenol

	Kg/h	Lb/h	%màssic	X_i
Para-nitrofenol	945,5	2084,8	70	0,7
Aigua	404,5	889,9	30	0,3
Total	1350	2974,7	100	1

Les condicions d'operació i dades necessàries per a realitzar el disseny de l'assecador són les següents:

Taula 11.61.- Condicions d'operació de l'assecador rotatori

Paràmetre	Valor
Temperatura d'entrada del gas (T_{eg} .- °F)	257 (125°C)
Temperatura humida (T_h .- °F)	102 (39°C)
Humitat d'entrada N ₂ ($H_{entrada}$.- lb aigua/lb aire sec)	0,01
Temperatura de sortida del sòlid (T_{ss} .- °F)	122 (50°C)
Temperatura de entrada de sòlid (T_{es} .- °F)	68 (20°C)
Capacitat calorífica del sòlid (C_{ps} .- Btu/lb °F)	0.25
Capacitat calorífica del vapor (C_{pv} .- Btu/lb °F)	0.45
Capacitat calorífica del líquid (C_{pl} .- Btu/lb °F)	1.0
Velocitat massica (G .- lb/ft ²)	700

Les dades exposades a la Taula 11.61 són bibliogràfiques (McCabe, 2001) a excepció de la temperatura de sortida del sòlid que es limita a 122°F (50°C) per a tenir condicions suaus d'operació i la temperatura humida que es calcula mitjançant el diagrama psicromètric Aire-Aigua que es pot veure a continuació:

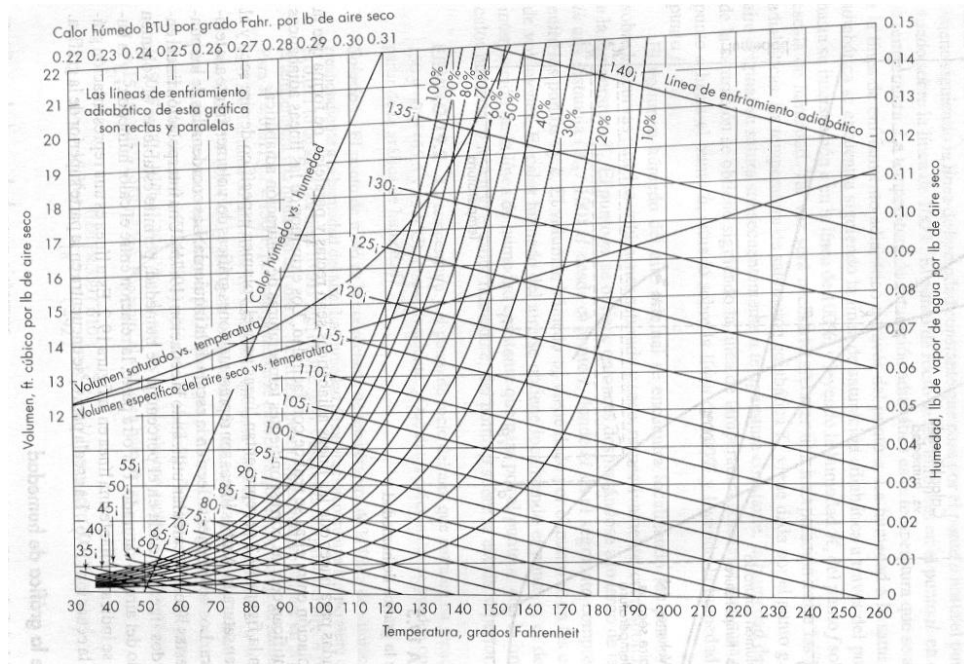


Figura 11.28.- Diagrama psicromètric del sistema aire-aigua

Per a trobar la temperatura de sortida del vapor es fa servir la següent fórmula:

$$Nt = \ln \frac{T_{\text{entrada gas}} - T_{\text{humida}}}{T_{\text{sortida gas}} - T_{\text{humida}}} = \frac{257 - 102}{T_{\text{sortida gas}} - 102} = 1,5$$

$$T_{\text{sortida gas}} = 136,6^{\circ} F \quad (58^{\circ} C)$$

Amb totes aquestes dades de les que es disposa i l'entalpia de vaporització de l'aigua a 102°F ($\lambda = 1036$ Btu/lb) ja es pot aplicar el balanç de matèria i energia de l'equip:

Balanç de matèria:

$$m_{\text{vapor}} = m_{\text{sòlid}} (X_a - X_b) = 2084,8 \cdot (0,3 - 0,11) = 396,1 \text{ lb} / h$$

$$m_g \cdot (1 + H_g) = \frac{Q_T}{C_{sg} \cdot (T_h - T_{sg})} = \frac{Q_T}{0,245 \text{ Btu} / \text{lb} \cdot (257 - 136,6)} = m_g \cdot (1 + 0,01)$$

Balanç d'energia:
$$\frac{Q_T}{m_s} = C_{ps} \cdot (T_{ss} - T_{es}) + C_{pl} \cdot X_a \cdot (T_h - T_{es}) +$$

$$+ \lambda \cdot (X_a - X_b) + C_{pl} \cdot X_b \cdot (T_{ss} - T_h) + (X_a - X_b) \cdot C_{pv} \cdot (T_{sg} - T_h) = 225,8 \text{ Btu} / \text{lb}$$

$$Q_T = 4,7 \cdot 10^5 \text{ Btu} / \text{h} \rightarrow m_g = 15781 \text{ lb} / \text{h} (= 7157 \text{ kg} \text{ } N_2 / \text{h})$$

on:

- Q_T .- calor aportat pel nitrogen calent
- m_s .- massa de sòlid a assecar (2084,8 lb/h)
- T_{ss} .- temperatura de sortida del sòlid (122 °F)
- T_{es} .- temperatura d'entrada del sòlid (68 °F)
- C_{pl} .- capacitat específica del líquid, Btu/lb
- C_{pv} .- capacitat específica del vapor, Btu/lb
- X_a .- fracció màssica d'aigua a l'entrada de l'assecador (0,3)
- X_b .- fracció màssica d'aigua a la sortida de l'assecador (0,11)
- T_h .- temperatura humida del gas a l'entrada (102 °F)
- T_{sg} .- temperatura de sortida del gas (136,6°F)
- m_g .- cabal màssic de gas necessari per a l'assecament, lb/h
- H_g .- humitat absoluta del gas a l'entrada de l'assecador

Amb els càlculs que ja s'han fet es pot obtenir la humitat que contindrà el gas a la sortida de l'assecador:

$$H_{gs} = H_g + \frac{m_v}{m_g} = 0,01 + \frac{396,1}{15781} = 0,035 \text{ lb} / \text{lb}$$

Per últim es poden obtenir els valors de les dimensions de l'assecador a partir de les següents equacions:

$$A_{\text{secció}} = \frac{m_g \cdot (1 + H_g)}{G} = \frac{15939}{700} = 22,8 \text{ ft}^2; \quad D = \sqrt{\frac{A_{\text{secció}}}{\pi/4}} = 5,4 \text{ ft} = 1,65 \text{ m}$$

$$L = \frac{Q_T}{0,125 \cdot \pi \cdot D \cdot G^{0,67} \cdot \Delta T} = 34,38 \text{ ft} = 10,5 \text{ m}$$

- **Disseny mecànic de l'assecador**

A continuació s'indica quin ha de ser el gruix de l'equip i el seu pes. L'assecador treballa a pressió atmosfèrica i a una temperatura màxima de 125°C. El material de construcció és AISI304 i el recipient és un tub cilíndric en posició horitzontal de diàmetre 1,65m i longitud 10,5m i capçals cònics.

Tant el càlcul del gruix en equips cilíndrics i cònics com el seu pes es fa de la mateixa manera que s'ha explicat anteriorment. El resultat d'aquestes variables es pot veure a la Taula 11.62:

Taula 11.62.- Disseny mecànic de l'assecador

Paràmetres	Valors
Volum total de l'equip (m ³)	22,45
Gruix del cos cilíndric (mm)	6
Gruix dels capçals torisfèrics (mm)	6
Pes de l'equip buit (kg)	2833
Pes de l'equip amb aigua (kg)	25285
Pes de l'equip en operació (kg)	16864

11.8.2 Disseny de l'assecador al buit (AB-801, AB-802)

Al recipient entra una massa de paracetamol de 503,97 Kg/h amb una humitat del 30% d'àcid acètic, també aquesta massa conté una petita quantitat de AAA, com s'observa a la següent taula:

Taula 11.63.- Composició del corrent d'entrada a l'assecador al buit

Components	Kg/batch	%
APAP	503,97	67,78
HOAc	237,37	31,92
AAA	2,2	0,3
Total	743,53	100

Aquest corrent s'introdueix al recipient (que té una mitja canya per bescanviar la calor que necessita la mescla), per carregar l'assecador amb el sòlid humit es triga 30 min, un cop transcorregut aquest temps es tanca la vàlvula d'entrada a l'assecador i s'obre l'altre vàlvula perquè el sòlid es pugui dipositar al segon assecador.

L'assecador dissenyat treballa a una pressió de 200 mm Hg perquè el APAP no pateixi descomposició per la elevada temperatura. Amb aquesta pressió l'àcid acètic s'evapora a 80°C, (es recorda que si es treballés a una pressió atmosfèrica llavors la temperatura d'evaporació de l'acètic seria de 125°C).

S'ha considerat que el temps de residència en l'assecador és de 25 min i 5 min més per descarregar el sòlid sec del assecador, això vol dir que amb dos assecadors que estiguin desfasats 30 min un de l'altre no fa falta dissenyar un tanc pulmó. En el moment que s'ha carregat tot el sòlid a l'interior de l'assecador, l'equip trigarà 30 min en assecar el sòlid i descarregar-lo, que es el mateix temps que es triga a carregar el segon assecador. A més es tindrà un tercer assecador en cas que es tingui un petit problema de funcionament o per algun augment en la demanda de paracetamol.

El cabal màssic que sortirà d'un assecador és el següent:

Taula 11.64.- Composició del corrent que surt de l'assecador

Components	Kg/batch	%
APAP	503,97	99,42
HOAc	0,73	0,15
AAA	2,2	0,43
Total	506,9	100

A continuació es calcula la massa d'àcid acètic que conté per massa de APAP sec a l'entrada hi ha la sortida de l'assecador:

$$W_{ent} = \frac{237,37 \text{ KgHOAc} / \text{batch}}{503,97 \text{ KgAPAP} / \text{batch}} = 0,47 \frac{\text{KgHOAc}}{\text{KgAPAP}}$$

$$W_{ent} = \frac{0,73 \text{ KgHOAc} / \text{batch}}{503,97 \text{ KgAPAP} / \text{batch}} = 1,45 \cdot 10^{-3} \frac{\text{KgHOAc}}{\text{KgAPAP}}$$

- **Dimensionament de l'equip.**

A continuació es realitzen els diferents càlculs per dimensionar l'assegador. Primer de tot es divideix el cabal màssic per les diferents densitats del compostos per trobar el cabal volumètric, el segon pas és trobar el volum de l'assegador amb el coneixement de que el temps de residència és de 25 min.

$$V_{mescla} = \frac{503,97 \text{ KgAPAP} / \text{batch}}{1293 \frac{\text{KgAPAP}}{\text{m}^3}} + \frac{237,37 \text{ KgHOAc} / \text{batch}}{1049 \frac{\text{KgHOAc}}{\text{m}^3}} + \frac{2,2 \text{ KgAAA} / \text{batch}}{1206 \frac{\text{KgAAA}}{\text{m}^3}} = 0,62 \frac{\text{m}^3}{\text{batch}}$$

$$V = 0,62 \frac{\text{m}^3}{\text{batch}} \cdot 1,5 = 0,93 \text{m}^3$$

Es decideix augmentar un 50% més per raons de seguretat ja que es tindrà una part gasosa (l'àcid acètic evaporat), llavors finalment el volum de l'assegador és de 0,93 m³.

L'assegador està situat de forma vertical. Les dimensions de l'assegador són les següents:

$$D_a = 0,8 \text{ m}; \quad h_a = 1,85 \text{ m}; \quad h_{sòlid} = 1,21 \text{ m}$$

- **Balanç d'energia**

Es fa circular per la mitja canya vapor d'aigua a 4,8 atm, d'aquesta manera el vapor d'aigua condensarà en el mateix moment que comenci a alliberar la seva energia al sòlid.

La quantitat de calor que necessita la mescla per incrementar la seva temperatura de 15°C a 80°C és:

$$Q = (m_{APAP} \cdot C_{pAPAP} + m_{HOAc} \cdot C_{pHOAc}) \cdot (T_{sort} - T_{ent}) + m_{HOAc} \cdot \lambda_{HOAc} =$$

$$= \left(503,97 \frac{\text{KgAPAP}}{\text{batch}} \cdot 1692 \frac{\text{J}}{\text{Kg} \cdot \text{K}} + 237,37 \frac{\text{KgHOAc}}{\text{batch}} \cdot 2336 \frac{\text{J}}{\text{Kg} \cdot \text{K}} \right) \cdot$$

$$(353\text{K} - 288\text{K}) + 2,89 \cdot 10^5 \frac{\text{J}}{\text{Kg}} \cdot 236,64 \frac{\text{KgHOAc}}{\text{batch}} = 9,23 \cdot 10^7 \frac{\text{J}}{\text{batch}}$$

On:

- $C_{p_{APAP}} = 1692 \text{ J/Kg}\cdot\text{K}$
- $C_{p_{HOAc}} = 1049 \text{ J/Kg}\cdot\text{K}$

Com que el sistema és adiabàtic llavors tota la calor alliberada pel vapor d'aigua, és la calor encarregada d'escalfar la mescla de paracetamol i acètic. El cabal de vapor d'aigua que condensa en l'interior de la mitja canya és:

$$m_{H_2O} = \frac{Q}{\lambda_{H_2O}} = \frac{9,23 \cdot 10^7 \frac{\text{J}}{\text{batch}} \cdot \frac{1 \text{ batch}}{25 \text{ min}} \cdot \frac{1 \text{ min}}{60 \text{ s}}}{2,112 \cdot 10^6 \frac{\text{J}}{\text{Kg}}} = 0,029 \frac{\text{Kg}}{\text{s}}$$

On:

- $\lambda_{H_2O} = 1976 \text{ J/Kg}\cdot\text{K}$

Ara es comprova que per aquesta calor que fa falta per escalfar la mescla es té la suficient àrea de bescanvi.

$$A_{\text{bescanvi}} = \frac{Q}{U \cdot \Delta T_{ml}}$$

$$\Delta T_{ml} = \frac{(T_{M1} - T_{L2}) - (T_{M2} - T_{L1})}{\ln \left(\frac{T_{M1} - T_{L2}}{T_{M2} - T_{L1}} \right)}$$

On:

-
- $A = \text{Àrea de bescanvi entre el reactor i la } \frac{1}{2} \text{ canya (m}^2\text{)}.$
- $U = \text{Coeficient global de Calor, } 450 \text{ W/m}^2 \cdot \text{°k}.$
- $\Delta T_{ml} = \text{Variació de la mitjana logarítmica de la temperatura.}$
- $T_{L1} = \text{Temperatura d'entrada de vapor d'aigua (K)}.$
- $T_{L2} = \text{Temperatura de sortida de l'aigua (K)}.$
- $T_{M1} = \text{Temperatura d'entrada de la mescla (K)}.$
- $T_{M2} = \text{Temperatura de sortida de la mescla (K)}.$

$$\Delta T_1 = |288 K - 423 K| = 135 K$$

$$\Delta T_2 = |353 K - 423 K| = 70 K$$

$$\Delta T_{ml} = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln\left(\frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}\right)} = 99 K$$

$$A = \pi \cdot D \cdot h_{líquid} = \pi \cdot 0,8m \cdot 1,2m = 3,02m^2$$

$$A_{bescanvi} = \frac{Q}{U \cdot \Delta T_{ml}} = \frac{6,15 \cdot 10^4 W}{450 \frac{W}{m^2 \cdot K} \cdot 99 K} = 1,38m^2$$

- **Disseny de la mitja canya**

El cabal de vapor d'aigua que circula per la mitja canya és de 0,029 Kg al segon. A continuació, es calcula quin és el diàmetre de la mitja canya per aconseguir que el vapor circuli a una velocitat apropiada.

En el present cas, se selecciona una velocitat de 20 m/s. Per calcular el diàmetre s'utilitzen les següents formules:

$$Q_V = v \cdot A_{\frac{1}{2}canya}$$

$$A_{\frac{1}{2}canya} = \frac{\pi}{4 \cdot 2} \cdot D_{\frac{1}{2}canya}^2$$

$$D_{\frac{1}{2}canya} = \sqrt{\frac{Q_V \cdot 8}{v \cdot \pi}}$$

On:

- Q_V = Cabal volumètric de refrigerant, m^3/s .
- $A_{1/2 canya}$ = Àrea de pas de la mitja canya, m^2 .
- $D_{1/2 canya}$ = Diàmetre de la mitja canya, m .
- v = Velocitat de pas, m/s .

$$D_{\frac{1}{2}canya} = \sqrt{\frac{0,029 \frac{Kg}{s} + 0,586 \frac{Kg}{m^3} \cdot 8}{20 \frac{m}{s} \cdot \pi}} = 0,08m$$

$$A_{\frac{1}{2}canya} = \frac{\pi}{4 \cdot 2} \cdot (0,08m)^2 = 2,5 \cdot 10^{-3} m^2$$

Es suposa que l'àrea que es perd entre els gruixos i soldadures és d'un centímetre. Es pot dir que els 3,02 m² (extrets d'un càlcul) és l'àrea de bescanvi.

- **Disseny mecànic**

A continuació es realitzen els càlculs per trobar els diferents gruixos de l'equip, la temperatura màxima a la qual treballa l'assecador és 80°C i 200 mm Hg de pressió. L'assecador està construït amb el material AISI-316.

Els càlculs del gruix i el pes de l'equip ja estan explicats anteriorment. Els gruix de les diferents parts de l'assecador són:

Taula 11.65.- Gruixos i pes de les diferents parts que componen l'assecador

Gruix del cilindre (mm)	5
Gruix de capçal semiesfèric superior (mm)	3
Gruix del capçal semiesfèric inferior (mm)	5
Pes de l'assecador buit (Kg)	254,1
Pes de l'assecador en operació (kg)	997,6

11.9 DISSENY DE CICLONS (CI-601, CI-602)

- **Disseny funcional dels ciclons**

Els ciclons són necessaris a l'àrea de purificació del para-nitrofenol ja que l'assegador fa passar una gran quantitat de nitrogen per a assecar el sòlid i una part d'aquest es veu arrossegat pel corrent gasós. Aquests sòlids que són arrossegats es volen recuperar però també es vol deixar el màxim de net el nitrogen ja que es reutilitzarà un cop hagi passat per un sistema de deshumidificació.

Per a aconseguir ambdós objectius s'empren dos ciclons col·locats en sèrie. El primer d'ells és un cicló Lapple estàndard i el segon és un cicló Stairmand o d'alta eficàcia. A la Figura 11.29 es poden veure les relacions geomètriques per a tots dos tipus de ciclons:

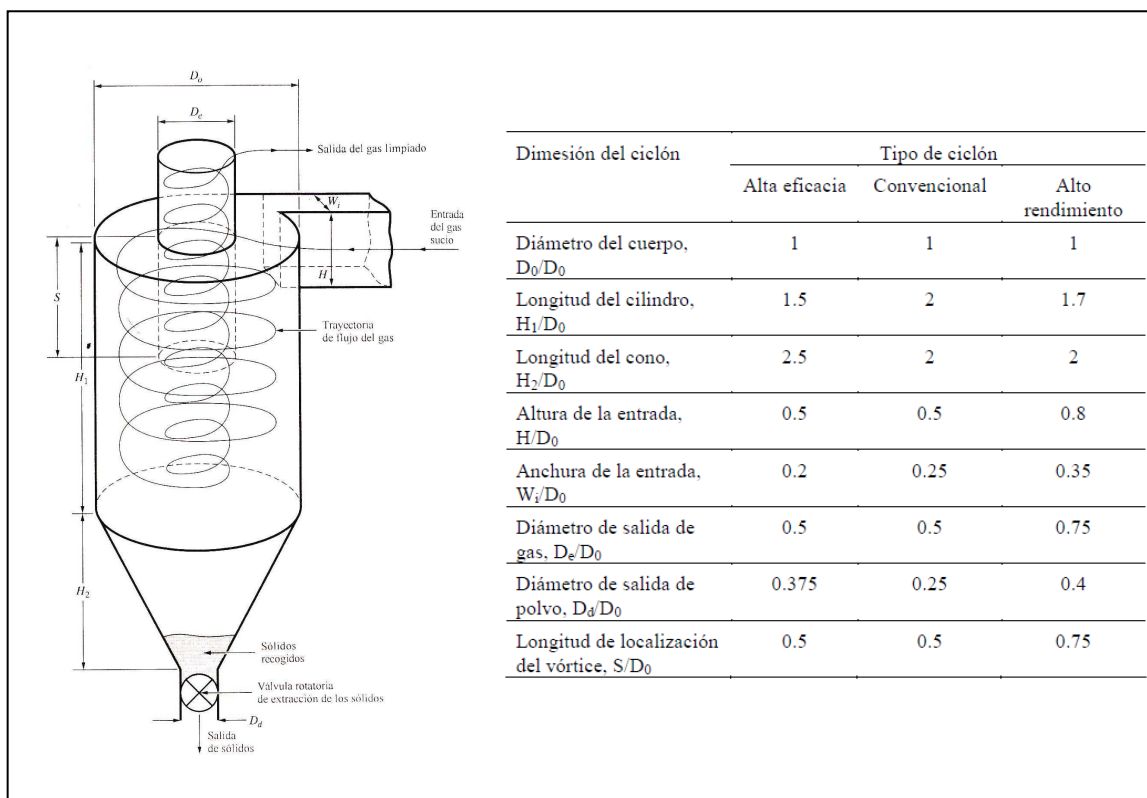


Figura 11.29.- Relacions geomètriques en funció del tipus de cicló

Amb aquestes relacions geomètriques es poden calcular totes les dimensions del cicló però el diàmetre del cicló no pot ser un qualsevol sinó que s'ha de desenvolupar un procés iteratiu mitjançant el qual s'arribi a calcular una pèrdua de càrrega que no superi els 2500 N/m².

El procés iteratiu consisteix en el següent:

- Suposició d'un diàmetre i estimació de les dimensions del cicló a partir de les relacions geomètriques de la Figura 11.29.

- Càlcul de l'àrea transversal al flux d'entrada:

$$A=b \cdot a \text{ (m}^2\text{)}$$

- Càlcul de la velocitat d'entrada de gas al cicló:

$$u=Q/A \text{ (m/s)}$$

- Càlcul de l'exponent del vòrtex:

$$n = 1 - (1 - 0,67 \cdot D^{0,14}) \cdot \left[\frac{T}{283} \right]^{0,3}$$

- Càlcul de l'eficàcia de cada fracció de partícules

$$\eta = 1 - \exp \left[-2 \left[\frac{(1+n) \cdot Q \cdot K}{D^3} \cdot \frac{\rho_p \cdot d_i^2}{18\mu} \right]^{\left(\frac{1}{2n+2} \right)} \right]$$

on:

- Q.- cabal volumètric, m³/s
- ρ_p .- densitat particular (1293 kg/m³)
- μ .- viscositat del gas (1,93e-5 kg/ms)
- d_i .- diàmetre de la fracció de les partícules, m
- K.-constant no geomètrica del cicló
- n.- exponent del vòrtex

Per a poder fer el càlcul d'aquesta última dada es necessita la distribució de les partícules de para-nitrofenol obtingudes de l'assecador. Aquesta distribució considerada es presenta a la Taula 11.66.

Taula 11.66. - Distribució de partícules de Pnp

di	%
90	4
120	16
140	41
155	27
190	9
210	2
260	1

Es considera que les partícules que es veuran arrossegades pel corrent de nitrogen en aquest equip seran les de 90 i 120 µm. La suma de les partícules d'aquestes mides corresponen al 20% del total de sòlid que surt de l'assecador. Per tant la mida de les partícules de para-nitrofenol que arriben al cicló de l'assecador i la seva distribució queden de la següent forma:

Taula 11.67. - Distribució de partícules de Pnp

di	%
90	25
120	75

- Càlcul de la fracció total recuperada:

$$\eta = \sum \eta_i \cdot m_i$$

on:

- m_i .- tant per 1 de cada fracció de partícules
- η_i .- eficàcia de separació de cada fracció

- Lectura de l'eficàcia corregida

L'eficàcia corregida es llegeix a partir de la concentració de partícules al corrent de gas en g/m^3 i de la gràfica representada a la Figura 11.30.

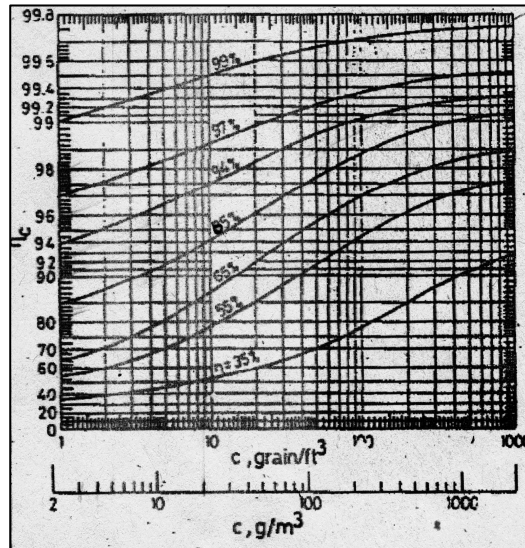


Figura 11.30.- Correcció de l'eficàcia en funció de la càrrega de partícules

- Càlcul de la pèrdua de càrrega (N/m^2)

$$\Delta P = 16 \cdot \frac{a \cdot b}{D_e^2} \cdot \frac{\rho \cdot u^2}{2}$$

on:

- ρ .- densitat del gas, kg/m^3
- u .- velocitat del gas, m/s

- Càlcul de la pèrdua de càrrega corregida (N/m^2)

$$\Delta P_c = \Delta P \cdot \frac{1}{1 + 0,0086\sqrt{c}}$$

on:

- C .- concentració de sòlid al flux de gas, g/m^3

Després de tot aquest procés iteratiu, les dimensions per a cada cicló són les següents:

Disseny Lapple			Disseny Stairmand	
Qgas (m3/s)	2,00		Qgas (m3/s)	2,00
Viscositat gas (kg/ms)	1,93E-05		Viscositat gas (kg/ms)	1,93E-05
K	40,3		K	55,1
D (m)	1,2		D (m)	0,9
a (m)	0,6	0,5	a (m)	0,45
b (m)	0,3	0,25	b (m)	0,18
s (m)	0,75	0,625	s (m)	0,45
De (m)	0,6	0,5	De (m)	0,45
h (m)	2,4	2	h (m)	1,35
H (m)	4,8	4	H (m)	3,6
B (m)	0,3	0,25	B (m)	0,34
Àrea (m2)	0,18		Àrea (m2)	0,081
Velocitat del gas (m/s)	11,1		Velocitat del gas (m/s)	24,7
Exponent del vòrtex	0,67		Exponent del vòrtex	0,61
Densitat part. (kg/m3)	1293		Densitat part. (kg/m3)	1293
Eficàcia 90	0,925		Eficàcia 90	0,976
Eficàcia 120	0,954		Eficàcia 120	0,988
Eficàcia mitjana	0,946		Eficàcia mitjana	0,982
C (g/m3)	26,2		C (g/m3)	0,52
Eficàcia corregida	0,98		Eficàcia corregida	0,985
Densitat del gas	0,98		Densitat del gas	0,98
AP (N/m2)	483,3		AP (N/m2)	1909,1
APc (N/m2)	462,9		APc (N/m2)	1897,3
Sòlid eliminat (kg/h)	185,3		Sòlid eliminat (kg/h)	3,73
Sòlid no eliminat (kg/h)	3,78		Sòlid no eliminat (kg/h)	0,057
			APtot	2360,2

- **Disseny mecànic**

Els ciclons estan formats per una part cilíndrica i una part cònica, per tant, s'ha calculat el gruix de la xapa de cada secció en cada cicló. El material utilitzat és l'AISI304 i les condicions utilitzades de disseny són una temperatura 69°C i una pressió de 1,3atm.

S'ha utilitzat la Figura 11.1 per a l'elecció dels gruixos i el càlcul del pes dels equips. Els resultats obtinguts han estat:

Taula 11.68.- Gruixos i pes dels equips

Paràmetres	CI-601	CI-602
Volum (m ³)	3,8	1,5
Gruix del cos cilíndric (mm)	6	5
Gruix dels capçals torisfèrics (mm)	6	5
Pes de l'equip buit (kg)	649,9	355,8
Pes de l'equip amb aigua (kg)	4449,9	1855,8
Pes de l'equip en operació (kg)	1124,9	573,3

11.10 KETTLE-REBOILER (E-501, E-701)

A continuació és planteja el esquema de càlcul per el disseny dels reboilers de la planta, els resultats exposats corresponen a l'equip E-701; l'equip E-501 és calcula seguint el mateix esquema.

Com que el kettle-reboiler no és un intercanviador convencional, ja que tenim un canvi de fase, no podem utilitzar el mètode de Kern doncs així seguirem els següents passos.

En la majoria de fluids escalfadors (en aquest cap vapor de servei), després de la seva utilització en aquest tipus de sistema, sol condensar, i per tant canviarà de fase. Habitualment s'utilitza vapor a pressió moderada, el qual circularà per tubs, i el fluid de procés que s'evaporarà parcialment per carcassa.

A causa d'aquests canvis de fase cal considerar un 5% de pèrdues, llavors, s'ha de sumar un 5% del valor de calor bescanviat a aquest mateix per considerar les pèrdues.

Les propietats dels corrents s'han trobat mitjançant els paquets termodinàmics del programa HYSYS, i venen resumits a la següent taula:

Taula 11.69 .- Propietats físiques dels corrents d'entrada i sortida al E-701.

Propietats	Tubs (vapor d'aigua)		Carcassa (procés)		
	ENTRADA	SORTIDA	ENTRADA	SORTIDA	SORTIDA
Fase	V	L	L	V	L
Temperatura (°C)	150,44	150,42	100	118	118
Pressió (N/m ²)	481300	481300	101325	101325	101325
Cabal màssic (kg/h)	816,89	816,87	5188,07	2184,89	3003,18
Densitat (kg/m ³)	2,462	903	989,7	1,4	1009
Viscositat (kg/ms)	1,39E-05	1,81E-04	8,02E-04	8,81E-06	5,77E-04
Calor latent (KJ/Kg)	2112.2		669,7	669,7	-
Cp (kJ/kg°C)	2,5789	4,318	1,92	1,428	1,851
Conductivitat (W/m°C)	0,029	0,687	0,2429	0,01955	0,1829

- El cabal d'entrada del fluid de procés se sobredimensiona un 25%, perquè el fluid tèrmic sigui capaç de transferir el calor necessari i així s'assegura el bescanvi desitjat.
- Es determina quin cabal de líquid del que entra es vol evaporar, el qual s'extreu del balanç de matèria.
- Càlcul del calor necessari que ha de aportar el vapor de servei a la mescla per evaporar-la i/o escalfar-la s'extreu del següent balanç d'energia.

$$Q = m_{\text{vapor servei}} \cdot C_p' \cdot (T_e - T_s) + m_{\text{vapor condensat}} \cdot \lambda_c = m \cdot C_p \cdot (T_f - T_0) + m' \cdot \lambda_v$$

$$Q = 1724650,044 \text{ KJ/h}$$

On:

- $Q \rightarrow$ Calor a intercanviar (KJ/h)
- $m_{\text{vapor servei}} \rightarrow$ Cabal del vapor de servei (kg/h)
- $m_{\text{vapor condensat}} \rightarrow$ Cabal de vapor que condensa (kg/h)
- $\lambda_c \rightarrow$ Calor latent de condensació del vapor (KJ/Kg)
- $C_p' \rightarrow$ Calor específic del vapor (KJ/Kg·°C)
- $T_e \rightarrow$ Temperatura d'entrada del vapor (°C)
- $T_s \rightarrow$ Temperatura de sortida del vapor (°C)

- $m' \rightarrow$ Cabal que es vol evaporar (Kg/h)
 - $\lambda_v \rightarrow$ Calor latent de vaporització de la mescla (KJ/Kg)
 - $m \rightarrow$ Cabal total de la mescla (Kg/h)
 - $C_p \rightarrow$ Calor específic de la mescla a T_0 (KJ/Kg.°C)
 - $T_f \rightarrow$ Temperatura sortida de la mescla (°C)
 - $T_0 \rightarrow$ Temperatura inicial de la mescla (°C)
- Es fixa la temperatura de sortida del vapor de servei. Però alhora de calcular la velocitat del vapor de servei per els tubs, es té que comprovar que aquesta velocitat esta dins el rang que s'indica seguidament, sinó es té que canviar aquesta temperatura.
- Càlcul del cabal de vapor de servei que serà necessari per subministrar el calor calculat anteriorment:

$$m_{\text{vapor servei}} = m_{\text{vapor condensat}} = \frac{Q}{[C_p' \cdot (T_e - T_s)] + \lambda_c} = 816,88 \text{Kg/h}$$

S'igualen els cabals perquè és condensarà tot el vapor.

- Càlcul del ΔTML del sistema, la circulació dels fluids serà en contracorrent ja que la transferència de calor serà més eficaç.

$$DTML = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}} = 40,77$$

$$\Delta T_1 = T_e - T_f$$

$$\Delta T_2 = T_s - T_0$$

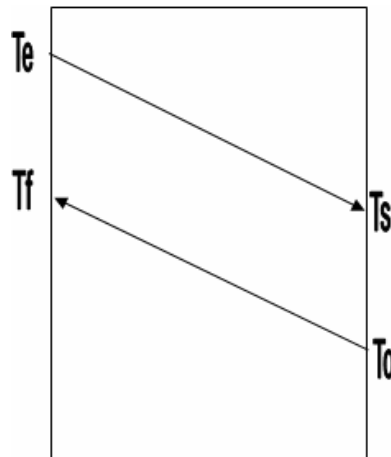


Figura 11.31.- Diagrama de temperatures en circulació contracorrent

- Decisió del número de passos per carcassa (N_{ps}) i del número de passos per tubs (N_{pt}), aquest també es un dels paràmetres important alhora de fer entrar els diferents paràmetres dins dels rangs.
- Es comença la iteració suposant un coeficient global de transferència U ($W/m^2 \cdot ^\circ C$), per trobar aquest primer valor s'utilitza la Figura 11.32:
- Càlcul de la superfície d'intercanvi de calor a partir dels valors calculats anteriorment.

$$A = \frac{Q}{U \cdot \Delta TML} = 16,79 \text{ m}^2$$

- $A \rightarrow$ Superfície d'intercanvi (m^2).

- El diàmetre dels tubs serà un dels paràmetres que poden modificar alhora de fer que la velocitat que circula el fluid per dins dels tubs estigui dins el rang requerit ja que aquesta dependrà directament del diàmetre. Es decideix un diàmetre extern i un espessor dels tubs per al kettle-reboiler tot seguint la taula 11.70.

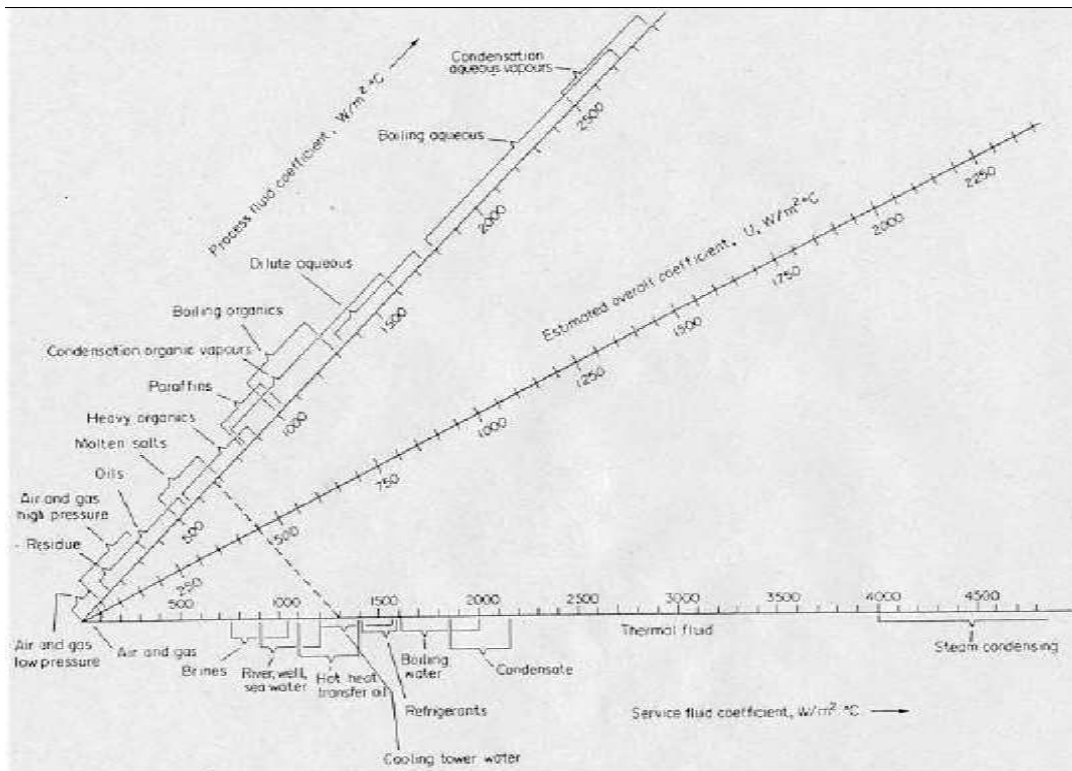


Figura 11.32.- Diagrama per la suposició del coeficient global de transferència U

Taula 11.70.- Taula de diàmetres i espessors per els tubs d'un intercanviador.

**Tubos para intercambiador de calor.
Soldados y sin soldadura de acero inoxidable**

Diámetro		Galga, B.W.G						
		22	20	18	16	14	12	11
Pulgadas	mm	Espesor / mm						
		0,71	0,89	1,24	1,65	2,11	2,77	3,05
		Peso: Kg/m						
5/8"	15,88	0,288	0,334	0,455	0,588	0,728	-	-
3/4"	19,05	0,348	0,405	0,553	0,719	0,895	-	-
1"	25,40	0,469	0,546	0,750	0,981	1,231	1,570	1,707
1 1/4"	31,80	-	-	0,949	1,246	1,569	2,014	2,196
1 1/2"	38,10	-	-	1,144	1,506	1,902	2,451	2,677
1 3/4"	44,45	-	-	1,342	1,768	2,237	2,891	3,162
2"	50,80	-	-	1,539	2,031	2,573	3,331	3,647
2 1/4"	57,15	-	-	1,736	2,293	2,908	3,772	4,132
2 3/8"	60,30	-	-	1,834	2,423	3,074	3,990	4,372
2 1/2"	63,50	-	-	1,933	2,555	3,244	4,212	4,617
2 3/4"	69,90	-	-	2,132	2,820	3,582	4,656	5,105
3"	76,20	-	-	2,327	3,080	3,915	5,093	5,587
3 1/2"	88,90	-	-	-	3,605	4,585	5,974	6,557
4"	101,60	-	-	-	4,130	5,256	6,855	7,526
4 1/2"	114,30	-	-	-	4,654	5,927	7,736	8,496

Un cop decidits aquest diàmetre extern i espessor de tub és pot calcular el diàmetre intern de la següent manera:

$$D_{\text{intern}} = D_{\text{extern}} - 2 \cdot \Delta x = 0,009075 \text{ m}$$

on:

- $D_{\text{extern}} \rightarrow$ Diàmetre extern del tub (m).
 - $\Delta x \rightarrow$ Espessor del tub (m).
 - $D_{\text{intern}} \rightarrow$ Diàmetre intern del tub (m).
- Suposar una longitud de tubs, aquesta longitud serà al igual que el diàmetre extern dels tubs un paràmetre clau en la iteració. La disposició dels tubs serà en U i la longitud suposada serà la corresponen a la mitja forquilla del tub en U. Els tubs poden agafar una longitud màxima de 15 metres.
 - Selecció del pitch, en aquest cas al tractar-se d'un reboiler és recomanable escollir un pitch quadrat ja que simplifica la neteja del equip.

$$\text{Pitch} = 1,5 \cdot D_{\text{extern}} = 0,024 \text{ m}$$

- Càlcul de l'àrea d'intercanvi d'un tub.

$$A_{\text{tub}} = 2 \cdot \Pi \cdot D_{\text{extern}} \cdot L = 0,19 \text{ m}^2$$

- $A_{\text{tub}} \rightarrow$ Superfície d'intercanvi d'un tub (m^2).
 - $L \rightarrow$ Longitud del tub (m).
- Determinació de numero totals de tubs i numero de tubs en U.

$$N_{\text{tubs totals}} = \frac{\text{Àrea total d'intercanvi}}{\text{Àrea d'un tub}} = 86,30 \text{ s'arrodoneix a } 87 \text{ tubs}$$

- Càlcul del diàmetre de feix de tubs, mitjançant una correlació amb unes constants que depenen del número de passos per tub, aquests constants s'extreuen de la Taula 11.71.

$$D_b = D_{extern} \cdot \left(\frac{N_t}{K_1} \right)^{\frac{1}{n_1}} = 0,298 \text{ m}$$

- $D_b \rightarrow$ Diàmetre del feix de tubs (m).
- $N_t \rightarrow$ Número de tubs totals.
- $K_1 \rightarrow$ constant.
- $n_1 \rightarrow$ constant.

Taula 11.71.- Constants per el càlcul del diàmetre del feix de tubs

TABLE 12.4. Constants for use in equation 12.3

Triangular pitch, $p_t = 1.25d_o$					
No. passes	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
Square pitch, $p_t = 1.25d_o$					
No. passes	1	2	4	6	8
K_1	0.215	0.156	0.158	0.0402	0.0331
n_1	2.207	2.291	2.263	2.617	2.643

Degut a que la taula anterior correspon al mètode de Kern per el càlcul de intercanviadors de calor de carcassa i tubs, és té un pitch de 1,25 vegades el diàmetre extern però per el kettle-reboiler el pitch es 1,5 vegades. Llavors s'ha d'ajustar el diàmetre del feix de tub per aquest pitch.

$$D'_b = \frac{1,50}{1,25} \cdot D_b = 0,357 \text{ m}$$

- Es comprova que la relació L / D_b' es troba entre els valor 4-6 aproximadament. Aquest paràmetre indica si la geometria del equip es correcta
- Càlcul de la velocitat de pas per un tub, aquest valor de la velocitat a de estar entre 1-3 m/s aproximadament.

$$v_t = \frac{Q_L}{A_{1tub} \cdot N_{tp}} = 1,06 \text{ m/s}$$

$$N_{tp} = \frac{N_t}{N_{pt}} = 21,75$$

on:

- $v_t \rightarrow$ Velocitat del fluid per tubs (m/s).
 - $Q_L \rightarrow$ Cabal volumètric total (m^3/s).
 - $N_{tp} \rightarrow$ Número de tubs per pas.
 - $N_{pt} \rightarrow$ Número de passos per tub.
- Càlcul del coeficient individual de transmissió per tubs a partir de la correlació de Dittus-Boelter per a líquid que es refreden.

$$Nu = 0,027 \cdot Re^{0,8} \cdot Pr^{0,3} = 152,29$$

$$Re_t = \frac{\ell \cdot v_t \cdot D_i}{\mu} = 4,79E+04$$

$$Pr = \frac{C_p \cdot \mu}{k} = 1,06$$

$$h_t = \frac{Nu \cdot k}{D_i} = 3488,80 \text{ W}/(\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C})$$

on:

- $Nu \rightarrow$ Nusselt.
- $Re_t \rightarrow$ Reynolds per el costat de tubs.
- $Pr \rightarrow$ Prandtl.
- $\ell \rightarrow$ Densitat del fluid que circula per tubs (Kg/m^3).
- $\mu \rightarrow$ Viscositat del fluid que circula per tubs ($\text{Kg}/\text{m}\cdot\text{s}$).
- $C_p \rightarrow$ Calor específic del fluid que circula per tubs ($\text{J}/\text{Kg}\cdot^\circ\text{C}$).
- $k \rightarrow$ Conductivitat tèrmica ($\text{W}/\text{m}\cdot^\circ\text{C}$).
- $h_t \rightarrow$ Coeficient individual de transmissió de calor per tubs ($\text{W}/\text{m}^2\cdot^\circ\text{C}$).

- Càlcul del coeficient individual de transmissió per carcassa a partir de la correlació de Mostinski.

$$h_s = 0,104 \cdot P_c^{0,69} \cdot \left(\frac{Q}{A}\right)^{0,7} \cdot \left[1,08 \cdot \left(\frac{P}{P_c}\right)^{0,17} + 4 \cdot \left(\frac{P}{P_c}\right)^{1,2} + 10 \cdot \left(\frac{P}{P_c}\right)^{10} \right]$$

$$h_s = 2452,30 \text{ W}/(\text{m}^2\cdot^\circ\text{C})$$

on:

- $P_c \rightarrow$ Pressió crítica de la mescla (bar).
- $P \rightarrow$ Pressió d'operació (bar).
- $h_s \rightarrow$ coeficient individual de transmissió de calor per carcassa ($\text{W}/\text{m}^2\cdot^\circ\text{C}$).

- Determinació del coeficient global de transmissió de calor, a partir dels coeficients individuals calculats anteriorment.

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_s} + \frac{1}{R_s} + \frac{D_E \cdot \ln\left(\frac{D_E}{D_i}\right)}{2 \cdot k} + \frac{D_E}{D_i} \cdot \frac{1}{R_t} + \frac{D_E}{D_i} \cdot \frac{1}{h_t}$$

$$U = 723,12 \text{ W}/(\text{m}^2\cdot^\circ\text{C})$$

on:

- $R_s \rightarrow$ Coeficient d'embrutiment per carcassa ($\text{W}/\text{m}^2\cdot^\circ\text{C}$).
- $K \rightarrow$ Conductivitat calorífica del acer ($\text{W}/\text{m}\cdot^\circ\text{C}$).
- $R_t \rightarrow$ Coeficient d'embrutiment per tubs ($\text{W}/\text{m}^2\cdot^\circ\text{C}$).

El coeficient global que resulta té que mantenir una diferencia de $\pm 15\%$, com a molt, amb el coeficient global suposant anteriorment. Si obtenim un coeficient superior vol dir que estem sobredimensionant i si surt mes petit s'està infradimensionant. El valor de la conductivitat calorífica del acer s'extreu de la bibliografia i els coeficients d'embrutiment els obtenim de la següent Taula 11.72:

Taula 11.72.- Coeficients d'embrutiment

Fluid	Coefficient ($W/m^2 \text{ } ^\circ C$)
River water	3000–12.000
Sea water	1000–3000
Cooling water (towers)	3000–6000
Towns water (soft)	3000–5000
Towns water (hard)	1000–2000
Steam condensate	1500–5000
Steam (oil free)	4000–10.000
Steam (oil traces)	2000–5000
Refrigerated brine	3000–5000
Air and industrial gases	5000–10.000
Flue gases	2000–5000
Organic vapours	5000
Organic liquids	5000
Light hydrocarbons	5000
Heavy hydrocarbons	2000
Boiling organics	2500
Condensing organics	5000
Heat transfer fluids	5000
Aqueous salt solutions	3000–5000

- o Per el càlcul del diàmetre de carcassa s'utilitza la següent taula, Taula 11.73, la qual ens relaciona el flux de calor (calor/superfície d'intercanvi) amb D_s/D_b .

Taula 11.73.- relació fluxos de calor amb D_s/D_b .

Flux de calor (W/m^2)	D_s/D_b
$2,27 \cdot 10^5$	2,20
$1,70 \cdot 10^5$	1,95
$1,40 \cdot 10^5$	1,60
$9,10 \cdot 10^4$	1,45
$<9,10 \cdot 10^4$	1,35

$$D_s = 0,48 \text{ m}$$

Hi un valor màxim per la relació flux de calor (Q/A), el valor del sistema a de ser un 70% més petita que la relació màxima que és calcula amb la següent correlació:

$$\left(\frac{Q}{A}\right)_{\max} = k_b \cdot \left(\frac{\text{pitch}}{D_e}\right) \cdot \frac{\lambda_{\text{liquidproc.es}}}{N_t^{0,5}} \cdot [\sigma \cdot g \cdot (\ell_l - \ell_v) \cdot \ell_v^2]^{1/4}$$

On:

- *Kb depèn del pitch que es tria i σ es la tensió superficial del líquid a evaporar.*
- El diàmetre de carcassa trobat anteriorment, s'ha de corregir si alhora de comprovar de la distància entre el nivell de líquid (freeboard) té un valor inferior a 0,25 m.

$$\text{freeboard} = D_s - h_{\text{liquid}} = 7,43 \cdot 10^{-2} \text{ m}$$

L'altura del líquid, es recomanable que estigui 2"per sobre del feix de tubs.

$$h_{\text{liquid}} = Db + (2 \cdot 2,254 \cdot 10^{-2}) = 0,41 \text{ m}$$

on:

- *Freeboard* → Distància entre la part superior de la carcassa i el líquid (m).
 - D_s → Diàmetre de carcassa (m).
 - h_{liquid} → Altura del líquid (m²).
 - D'_s → Diàmetre de carcassa corregit (m)
- Si el freeboard té un valor inferior a 0,25m → $D'_s = D_s + (0,25 - \text{freeboard})$.
- Si el freeboard té un valor superior a 0,25m → $D'_s = D_s$
- També s'ha d'avaluar la velocitat del vapor per carcassa, per això necessitem mesurar l'àrea de superfície del líquid.

Es defineix la distància entre el nivell de líquid i el feix de tub com $W_H = D_s - D_b - \text{freeboard}$ i l'amplada que ocupa el líquid respecte el diàmetre de carcassa (L_c) és calcula amb la relació següent:

$$L_c = \left(D_S^2 - W_H^2 \right)^{1/2} = 0,62 \text{ m}$$

Amb això ja es pot calcular la velocitat del vapor per carcassa:

$$v_{\text{vapor}} = \frac{m_{\text{vapor}}}{\rho_{\text{vapor}} \cdot (L_c \cdot L)} = 0,28 \text{ m/s}$$

on:

- $L_c \rightarrow$ Amplada (m).
- $W_H \rightarrow$ Distància entre el nivell de líquid i el feix de tub (m).
- $v_{\text{vapor}} \rightarrow$ Velocitat del vapor (m/s).
- $m_{\text{vapor}} \rightarrow$ Cabal màssic de vapor (Kg/s).
- $\rho_{\text{vapor}} \rightarrow$ Densitat del vapor (Kg/m³).
- $L \rightarrow$ Longitud del tram que a de recorre el vapor (m).

A més a més també s'ha de calcular la velocitat crítica del vapor, ja que la velocitat del vapor mai pot superar aquesta velocitat crítica.

$$v_c = 0,2 \cdot \left(\frac{\rho_{\text{liquid}} - \rho_{\text{vapor}}}{\rho_{\text{vapor}}} \right)^{0,5} = 5,37 \text{ m/s}$$

- $\rho_{\text{liquid}} \rightarrow$ Densitat del líquid (Kg/m³).
- En la determinació de les pèrdues de càrrega s'ha de tenir en compte que les pèrdues per carcassa en un kettle-reboiler es poden depreciar i en el cas del tubs es poden calcular a partir de la següent expressió, i el valor obtingut no pot superar 50-70 KN/m²:

$$\Delta P_t = N_{pt} \cdot \left[8 \cdot j_f \cdot \frac{L}{D_i} + 2,5 \right] \cdot \frac{\ell \cdot v_t^2}{2} = 4,46 \text{ N/m}^2$$

- $\Delta P_t \rightarrow$ Pèrdua de carrega per tubs N/m^2 .
- $N_{pt} \rightarrow$ Número de passos per tub.
- $j_f \rightarrow$ Factor de fricció pel fluid de tubs, és troba el seu valor mitjançant la Figura 11.33 i es funció del Reynolds.
- $D_i \rightarrow$ Diàmetre intern dels tubs (m).
- $\ell \rightarrow$ Densitat del fluid que circular per tubs (Kg/m^3).
- $L \rightarrow$ Longitud dels tubs (m).
- $v_t \rightarrow$ Velocitat per tubs (m/s).

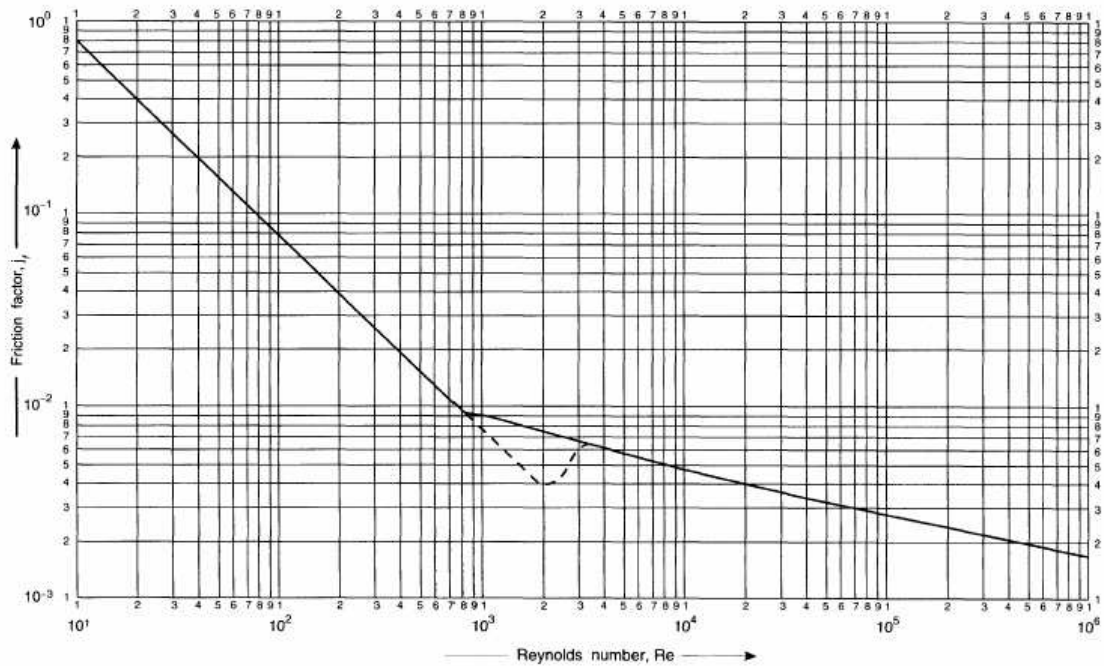


Figura 11.33- Factor de fricció pel fluid de tubs.

- Per determinar el pes total del equip buit es tindran que seguir els següents passos:

- Pes dels fondos:

Primer s'haurà de calcular el àrea dels fondos mitjançant la següent expressió:

$$A_{fondos} = 0,918 \cdot D_s^2 = 3,98 \cdot 10^{-1} \text{ m}^2$$

El pes dels fondos és calcula com: $P_{fondos} = A_{fondos} \cdot t \cdot \ell_{acer} = 18,85 \text{ Kg}$

- P_{fondos} → Pes dels fondos (kg).
- ℓ_{acer} → Densitat del AISI 316L (7900 Kg/m³).
- A_{fondos} → Superfície dels fondos (m²).
- t → Espessor de la xapa del fondo (m).

- Pes del feix de tubs: $P_{tubs} = N_{tubs} \cdot L_{tubs} \cdot \ell_{tubs} = 178,59 \text{ Kg}$

- P_{tubs} → Pes dels tubs (kg).
- N_{tubs} → Numero de tubs.
- L_{tubs} → Longituds de tubs (m).
- t → Espessor de la xapa del fondo (m).

- Pes de carcassa:

$$P_{carcasa} = A_{carcasa} \cdot t \cdot \ell_{acer} = 228,66 \text{ Kg}$$

$$A_{carcasa} = \pi \cdot D_s \cdot L_{carcasa} = 4,13 \text{ m}^2$$

$$P_{buit} = P_{fondos} + P_{tubs} + P_{carcasa} = 426,09 \text{ Kg}$$

- $P_{carcassa} \rightarrow$ Pes de la carcassa (kg).
 - $A_{carcassa} \rightarrow$ Superfície de la carcassa (m^2).
 - $L_{carcassa} \rightarrow$ Longituds de la carcassa (m).
- En aquest cas per determinar el pes del equip ple d'aigua, s'aproximarà al volum del equip al volum de carcassa.

$$V_{equip} = \frac{\pi}{4} \cdot D_{carcassa}^2 \cdot L_{carcassa} = 6,80 \cdot 10^{-1} \text{ m}^3$$

$$P_{ple \text{ d'aigua}} = P_{buit} + V_{equip} \cdot \ell_{d'aigua} = 1106,39 \text{ Kg}$$

- Per determinar el pes del equip en operació, es tindrà que calcular el pes amb el vapor i amb el pes del fluid de procés a escalfar.

$$P_{vapor} = N_{tubs} \cdot \left(\frac{\pi}{4} \cdot D_i^2 \cdot L_{tub} \right) \cdot \ell_{vapor} = 10,16 \text{ Kg}$$

- $P_{fluid \text{ tèrmic}} \rightarrow$ Pes del vapor (kg).
- $\ell_{fluid \text{ tèrmic}} \rightarrow$ Densitat del vapor (Kg/m^3).

Per determinar el pes del equip primer tindrem que determinar quina part ocupa aquest dins de la carcassa.

$$V_{carcassa} = \%_{ocupacio} \cdot V_{equip} = 5,44 \cdot 10^{-1} \text{ m}^3$$

$$V_{ocupat \text{ tubs}} = N_{tubs} \cdot \frac{\pi}{4} \cdot D_e^2 \cdot L_{tubs} = 3,44 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3$$

$$V_{ocupat \text{ fluid procés}} = V_{carcassa \text{ ocupat}} - V_{ocupat \text{ tubs}} = 5,10 \cdot 10^{-1} \text{ m}^3$$

$$P_{fluid \text{ procés}} = V_{ocupat \text{ fluid procés}} \cdot \ell_{fluid \text{ procés}} = 504,55 \text{ Kg}$$

$$P_{operació} = P_{buit} + P_{fluid \text{ procés}} + P_{fluid \text{ tèrmic}} = 940,80 \text{ Kg}$$

- El aïllant que es necessita per aquest equip es calcula mitjançant el programa ISOVER.

11.11 **CONDENSADORS (E-502, E-504 I E-604)**

A continuació és planteja el esquema de càlcul per el disseny dels condensadors de la planta, s'exposen els resultats del E-603.

Com que els condensadors no es un intercanviador convencional, ja que tenim un canvi de fase del fluid de procés, no podem utilitzar el mètode de Kern doncs així seguirem els següents passos. Cal recordar que en aquest cas el fluid refrigerant va per tubs i el fluid que condensa per carcassa

Les propietats dels corrents s'han trobat mitjançant els paquets termodinàmics del programa HYSYS, i venen resumits a la següent taula:

Taula 11.74.- Propietats físiques dels corrents d'entrada i sortida al E-603.

Propietats	Tubs (aigua)		Carcassa (procés)	
	ENTRADA	SORTIDA	ENTRADA	SORTIDA
Fase	L	L	V	L
Temperatura (°C)	30	40	115	40
Pressió (N/m ²)	101325	101325	101325	101325
Cabal màssic (kg/h)	53560,32	53560,32	938,70	938,70
Densitat (kg/m ³)	995,6	994,1	0,5809	1012
Viscositat (kg/ms)	7,97E-04	7,25E-04	0	9,37E-04
Cp (kJ/kg°C)	4,1784	4,1785	2,035	4,108
Conductivitat (W/m°C)	0,575	0,570	0	0,593

- El cabal d'entrada del fluid de procés és sobredimensiona un 25%, perquè el fluid refrigerant sigui capaç de endur-se tot calor necessari i així s'assegura el bescanvi desitjat.
- Determinar quin cabal de vapor del que entra es vol condensar, el qual s'extreu del balanç de matèria.
- El càlcul del calor a intercanviar entre la mescla a condensar i el fluid refrigerant, és tenen que plantejar un dels següents balanços energètics.

Si s'ha de condensar tot el cabal de líquid que entra o una part, l'expressió de calor serà:

$$Q = m' \cdot \lambda$$

Si a més de condensar la mescla també es vol refredar s'utilitza la següent expressió:

$$Q = m' \cdot \lambda + m \cdot C_p \cdot (T_{eb} - T_0) + m \cdot C_p' \cdot (T_f - T_{eb})$$

En el cas que la C_p no variï molt amb la temperatura es pot agafar com a constant i així l'expressió pel càlcul del calor quedaria com:

$$Q = m' \cdot \lambda + m \cdot C_p \cdot (T_f - T_0)$$

$$Q = 2238004,72 \text{ KJ/h}$$

- $Q \rightarrow$ Calor a intercanviar (KJ/h)
 - $m' \rightarrow$ Cabal que es vol condensar (Kg/h)
 - $\lambda \rightarrow$ Calor latent de condensació de la mescla (KJ/Kg)
 - $m \rightarrow$ Cabal total de la mescla (Kg/h)
 - $C_p \rightarrow$ Calor específic de la mescla a T_0 (KJ/Kg·°C)
 - $T_{cond.} \rightarrow$ Temperatura de condensació de la mescla (°C)
 - $T_0 \rightarrow$ Temperatura inicial de la mescla (°C)
 - $C_p' \rightarrow$ calor específic de la mescla a T_f (KJ/Kg·°C)
 - $T_f \rightarrow$ Temperatura final de la mescla (°C)
- És fixa la temperatura de sortida del refrigerant. Però alhora de calcular la velocitat del fluid refrigerant per els tubs, es té que comprovar que aquesta velocitat esta dins el rang que s'indica seguidament, sinó es té que canviar aquesta temperatura.
 - Càlcul del cabal de fluid refrigerant que serà necessari per extreure el calor calculat anteriorment

$$m_f = \frac{Q}{C_p \cdot (T_e - T_s)} = 53560,32$$

- $mf \rightarrow$ Cabal de refrigerant necessari (Kg/h)
 - $C_p \rightarrow$ Calor específic del refrigerant (KJ/Kg·°C)
 - $T_e \rightarrow$ Temperatura d'entrada del refrigerant (°C)
 - $T_s \rightarrow$ Temperatura de sortida del refrigerant (°C)
- Càlcul del ΔT_{ML} del sistema, la circulació dels fluids serà en contracorrent ja, com el cas dels kettle-reboilers, que la transferència de calor serà més eficaç.

$$DTML = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}} = 32,26$$

$$\Delta T_1 = T_e - T_f; \quad \Delta T_2 = T_s - T_0$$

- Es comença la iteració suposant un coeficient global de transferència U, per trobar aquest primer valor s'utilitza la Figura 11.32, que es troba en l'apartat dels kettle-reboiler.
- $U \rightarrow$ Coeficient global de transferència ($W/m^2 \cdot ^\circ C$).
- Càlcul de la superfície d'intercanvi de calor a partir dels valors calculats anteriorment.

$$A = \frac{Q}{U \cdot DTML} = 25,69 \text{ m}^2$$

- $A \rightarrow$ Superfície d'intercanvi (m^2).
- El diàmetre dels tubs serà un dels paràmetres que poden modificar alhora de fer que la velocitat que circula el fluid per dins dels tubs estigui dins el rang requerit ja que aquesta dependrà directament del diàmetre. Es decideix un diàmetre extern i un espessor dels tubs, tot seguint la Taula 11.70 que es troba en l'apartat dels kettle-reboiler.

Un cop decidits aquest diàmetre extern i espessor de tub és pot calcular el diàmetre intern de la següent manera:

$$D_{\text{intern}} = D_{\text{extern}} - 2 \cdot \Delta x = 0,0135 \text{ m}$$

- $D_{\text{extern}} \rightarrow$ Diàmetre extern del tub (m).
 - $\Delta x \rightarrow$ Espessor del tub (m).
 - $D_{\text{intern}} \rightarrow$ Diàmetre intern del tub (m).
- Suposar una longitud de tubs, aquesta longitud serà al igual que el diàmetre extern dels tubs un paràmetre clau en la iteració. En aquest cas al tractar-se d'un condensador només tindrem un pas per tubs. Els tubs poden agafar una longitud màxima de 15 metres.
 - Selecció del pitch, en aquest cas al tractar-se d'un condensador és recomanable escollir un pitch quadrat ja que simplifica la neteja del equip.

$$\text{Pitch} = 1,25 \cdot D_{\text{extern}} = 0,01351 \text{ m}$$

- Càlcul de l'àrea d'intercanvi d'un tub.

$$A_{1\text{tub}} = 2 \cdot \Pi \cdot D_{\text{extern}} \cdot L = 0,26 \text{ m}^2$$

- $A_{1\text{tub}} \rightarrow$ Superfície d'intercanvi d'un tub (m^2).
 - $L \rightarrow$ Longitud del tub (m).
- Determinació de numero totals de tubs i numero de tubs en U.

$$N_{\text{tubs totals}} = \frac{\text{Àrea total d'intercanvi}}{\text{Àrea d'un tub}} = 97,57 \text{ s'arrodoneix a } 98 \text{ tubs}$$

- Càlcul del diàmetre de feix de tubs, mitjançant una correlació amb unes constants que depenen del número de passos per tub, aquests constants s'extreuen de la Taula 11.71 en l'apartat del càlcul d'un kettle-reboiler.

$$D_b = D_{\text{extern}} \cdot \left(\frac{N_t}{K_1} \right)^{\frac{1}{n_1}} = 0,366 \text{ m}$$

- $D_b \rightarrow$ Diàmetre del feix de tubs (m).
- $N_t \rightarrow$ Número de tubs totals.
- $K_1 \rightarrow$ constant.
- $n_1 \rightarrow$ constant.

En aquest cas K_1 i n_1 són les corresponent a un pas per tub.

- Es comprova que la relació L/D_b es troba entre els valor 4-6 aproximadament. Aquest paràmetre indica si la geometria del equip es correcta
- Càlcul de la velocitat de pas per un tub, aquest valor de la velocitat a de estar entre 1-3 m/s aproximadament.

$$v_t = \frac{Q_L}{A_{\text{tub}} \cdot N_{tp}} = 1,06 \text{ m/s}$$

$$N_{tp} = \frac{N_t}{N_{pt}} = 98$$

- $v_t \rightarrow$ Velocitat del fluid per tubs (m/s).
 - $Q_L \rightarrow$ Cabal volumètric total (m^3/s).
 - $N_{tp} \rightarrow$ Número de tubs per pas.
 - $N_{pt} \rightarrow$ Número de passos per tub.
- Càlcul del coeficient individual de transmissió per tubs a partir de la correlació de Dittus-Boelter per a líquid que es refreden.

$$Nu = 0,027 \cdot Re^{0,8} \cdot Pr^{0,3} = 118,95$$

$$Re_t = \frac{\ell \cdot v_t \cdot D_i}{\mu} = 1,88 \cdot 10^4$$

$$Pr = \frac{C_p \cdot \mu}{k} = 5,55$$

$$h_t = \frac{Nu \cdot k}{D_i} = 5203,49 \text{ W/m}^2 \cdot \text{°C}$$

- $Nu \rightarrow$ Nusselt.
 - $Re_t \rightarrow$ Reynolds per el costat de tubs.
 - $Pr \rightarrow$ Prandtl.
 - $\ell \rightarrow$ Densitat del fluid que circula per tubs (Kg/m^3).
 - $\mu \rightarrow$ Viscositat del fluid que circula per tubs ($\text{Kg/m} \cdot \text{s}$).
 - $C_p \rightarrow$ Calor específic del fluid que circula per tubs ($\text{J/Kg} \cdot \text{°C}$).
 - $k \rightarrow$ Conductivitat tèrmica ($\text{W/m} \cdot \text{°C}$).
 - $h_t \rightarrow$ Coeficient individual de transmissió de calor per tubs ($\text{W/m}^2 \cdot \text{°C}$).
- Càlcul del coeficient individual de transmissió per carcassa a partir de la correlació de Mostinski.

$$h_s = 0,104 \cdot P_c^{0,69} \cdot \left(\frac{Q}{A}\right)^{0,7} \cdot \left[1,08 \cdot \left(\frac{P}{P_c}\right)^{0,17} + 4 \cdot \left(\frac{P}{P_c}\right)^{1,2} + 10 \cdot \left(\frac{P}{P_c}\right)^{10} \right]$$

$$h_s = 2337,04 \text{ W/m}^2 \cdot \text{°C}$$

- $P_c \rightarrow$ Pressió crítica de la mescla (bar).
 - $P \rightarrow$ Pressió d'operació (bar).
 - $h_s \rightarrow$ coeficient individual de transmissió de calor per carcassa ($\text{W/m}^2 \cdot \text{°C}$).
- Determinació del coeficient global de transmissió de calor, a partir dels coeficients individuals calculats anteriorment.

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_s} + \frac{1}{R_s} + \frac{D_e \cdot \ln\left(\frac{D_e}{D_i}\right)}{2 \cdot k} + \frac{D_e}{D_i} \cdot \frac{1}{R_t} + \frac{D_e}{D_i} \cdot \frac{1}{h_t}$$

$$U = 797,62 \text{ W/m}^2 \cdot \text{°C}$$

- $R_s \rightarrow$ Coeficient d'embrutiment per carcassa ($W/m^2 \cdot ^\circ C$).
- $K \rightarrow$ Conductivitat calorífica del acer ($W/m \cdot ^\circ C$).
- $R_t \rightarrow$ Coeficient d'embrutiment per tubs ($W/m^2 \cdot ^\circ C$).

El valor de la conductivitat calorífica del acer s'extreu de la bibliografia i els coeficients d'embrutiment els obtenim de la següent Taula 11.72, situada en l'apartat del càlcul d'un kettle-reboiler

El coeficient global que resulta té que mantenir una diferencia de $\pm 15\%$, com a molt, amb el coeficient global suposant anteriorment. Si obtenim un coeficient superior vol dir que estem sobredimensionant i si surt mes petit s'està infradimensionant.

- Per el càlcul del diàmetre de carcassa s'utilitza la següent equació:

$$D_s = \Delta x + D_b = 0,379 \text{ m}$$

- $D_s \rightarrow$ Diàmetre de carcassa (m).
 - $\Delta x \rightarrow$ Diferencia entre el feix de tubs i el diàmetre de carcassa (m).
- Estimació de la velocitat per carcassa, es tindran que comprovar que les velocitats per el costat de carcassa son les correctes, aquesta velocitat estarà entre 10-30 m/s per el vapor a pressió atmosfèrica. En aquest cas és calcula la velocitat de circulació del vapor que ha de condensar seguint els següents passos:

$$D_{eq} = \frac{1,27}{D_e} (\text{pitch}^2 - 0,785 \cdot D_e^2) = 3,54 \cdot 10^{-2} \text{ m}$$

- $D_{eq} \rightarrow$ Diàmetre equivalent (m).
- $Pitch \rightarrow$ Calculat anteriorment (m).

$$A_{st} = \left(\frac{l_B \cdot D_s \cdot (\text{pitch} - D_e)}{(\text{pitch} \cdot nps)} \right) = 3,34 \cdot 10^{-2} \text{ m}$$

$$v_s = \frac{m_s}{A_{st} \cdot \ell_s} = 13,43 \text{ m/s}$$

- $A_{st} \rightarrow$ Àrea transversal de la carcassa (m^2)
 - $l_B \rightarrow$ Distància entre les pantalles deflectores (m). (Aquest valor varia entre 0,2-1 vegades el diàmetre de carcassa)
 - $D_e \rightarrow$ Diàmetre extern del tub (m).
 - $nps \rightarrow$ Número de passos per carcassa.
 - $v_s \rightarrow$ Velocitat del fluid per carcassa (m/s).
 - $m_s \rightarrow$ cabal màssic que circula per carcassa, en aquest cas el vapor que condensa (Kg/h).
 - $\ell_s \rightarrow$ Densitat del fluid que circula per carcassa (Kg/m^3).
- Estimació del número de pantalles deflectores utilitzant la següent equació:

$$N_p = \frac{L}{l_B} - 1 = 8$$

- $N_p \rightarrow$ Número de pantalles deflectores.
 - $L \rightarrow$ Longitud dels tubs. (m)
- Determinació de les pèrdues de carrega.

Als tubs:

$$\Delta P_t = N_{pt} \cdot \left[8 \cdot j_f \cdot \frac{L}{D_i} + 2,5 \right] \cdot \frac{\ell \cdot v_t^2}{2} = 20,18 \text{ KN/m}^2$$

El valor de ΔP_t no pot superar 50-70 KN/m^2 .

- $\Delta P_t \rightarrow$ Pèrdua de carrega per tubs (N/m^2).
- $N_{pt} \rightarrow$ Número de passos per tub.
- $j_f \rightarrow$ Factor de fricció pel fluid de tubs, és troba el seu valor mitjançant la Figura 11.33 i es funció del Reynolds.
- $D_i \rightarrow$ Diàmetre intern dels tubs (m).
- $\ell \rightarrow$ Densitat del fluid que circular per tubs (Kg/m^3).
- $L \rightarrow$ Longitud dels tubs (m).
- $v_t \rightarrow$ Velocitat per tubs (m/s).

A la carcassa:

$$\Delta P_s = n_{ps} \cdot 8 \cdot j_f \cdot \left(\frac{D_e}{D_{eq}} \right) \cdot \left(\frac{L}{l_B} \right) \cdot \left(\frac{\rho_s \cdot v_s^2}{2} \right) = 26,58 \text{ KN/m}^2$$

El valor de ΔP_s no pot superar 35 KN/m².

- $\Delta P_s \rightarrow$ Pèrdua de carrega per tubs (N/m²).
- $n_{ps} \rightarrow$ Número de passos per carcassa.
- $j_f \rightarrow$ Factor de fricció pel fluid de carcassa, és troba el seu valor mitjançant la Figura 11.34 i es funció del Reynolds.
- $D_e \rightarrow$ Diàmetre extern dels tubs (m).
- $D_{eq} \rightarrow$ Diàmetre equivalent (m).
- $\rho_s \rightarrow$ Densitat del fluid que circular per carcassa (Kg/m³).
- $L \rightarrow$ Longitud dels tubs (m).
- $l_B \rightarrow$ Distància entre les pantalles deflectores (m).
- $v_t \rightarrow$ Velocitat per tubs (m/s).

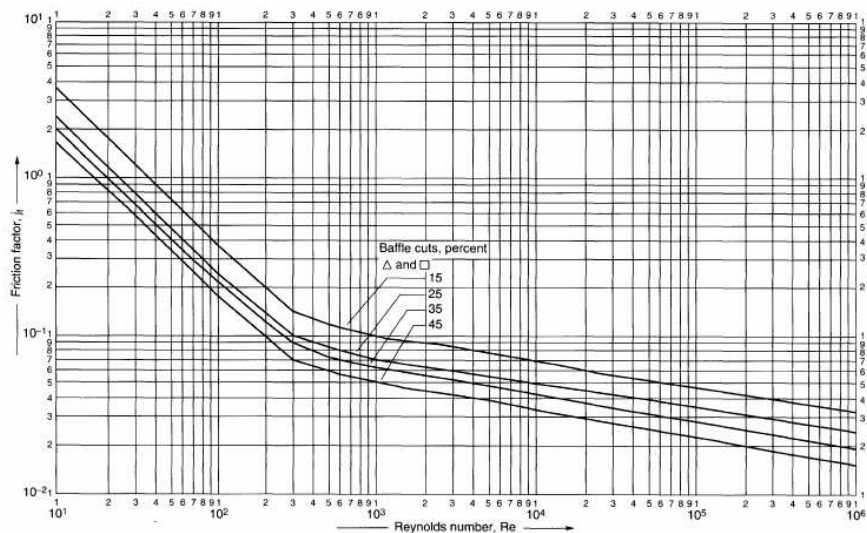


Figura 11.34.- Factor de fricció de calor pel fluid de carcassa.

- El càlcul dels espessors de la xapa dels equips se ha realitzat mitjançant les equacions del codi ASME de la mateixa manera que els tancs d'emmagatzematge.
- Per determinar el pes total del equip en operació és tindran que seguir els mateixos passos que en el càlcul del kettle-reboiler:
- El aïllant que es necessita per aquest equip es calcula mitjançant el programa ISOVER.

11.12 INTERCANVIADORS DE CALOR DE CARCASSA I TUBS (E-503)

Seguidament és detalla, de forma general, com s'han calculat els equips d'intercanvi de calor de la planta. Les propietats dels corrents s'han trobat mitjançant els paquets termodinàmics del programa HYSYS, i venen resumits a la següent taula:

Taula 11.75.- Propietats físiques dels corrents d'entrada i sortida al E-503.

Propietats	Tubs (procés)		Carcassa (aigua)	
	ENTRADA	SORTIDA	ENTRADA	SORTIDA
Fase	L	L	L	L
Temperatura (°C)	25	70,5	90	70
Pressió ((N/m ²))	101325	101325	101325	101325
Cabal màssic (kg/h)	29272,51	28863,81	36350,87	36485,36
Densitat (kg/m ³)	1570,8	1537,8	965,3	977,8
Viscositat (kg/ms)	4,17E-03	1,89E-03	3,15E-04	4,04E-04
Cp (kJ/kg°C)	2,2953	2,3278	4,205	4,1895
Conductivitat (W/m°C)	0,34973	0,37267	0,6853	0,6623

El cabal d'entrada del fluid de procés és sobredimensiona un 25%, perquè el aigua calenta o el refrigerant sigui capaç de transferir o endur-se més calor i així s'assegura el bescanvi desitjat

Per el seu disseny és seguirà el mètode de Kern.

- Balanç tèrmic.

Per a la decisió del fluid que circularà per carcassa i del que circularà per tubs, és mira quin dels dos fluids és més corrosiu el més corrosiu circularà per tubs circulant l'altre per carcassa.

- Càlcul del calor a intercanviar i del cabal de fluid refrigerant necessari.

$$Q = M_s \cdot C_{p_s} \cdot (T_1 - T_2) = m_t \cdot C_{p_t} \cdot (t_2 - t_1)$$

$$Q = 3057108,07 \text{ KJ/h}$$

- $Q \rightarrow$ Calor a intercanviar (KJ/h)
 - $M_s \rightarrow$ Cabal que circula per carcassa (Kg/h)
 - $Cp_s \rightarrow$ Calor específic de la mescla que circula per carcassa (KJ/Kg.°C)
 - $T_1 \rightarrow$ Temperatura d'entrada del fluid en el costat de carcassa (°C)
 - $T_2 \rightarrow$ Temperatura de sortida del fluid en el costat de carcassa (°C)
 - $m \rightarrow$ Cabal que circula per tubs (Kg/h)
 - $Cp_t \rightarrow$ calor específic de la mescla que circula per tubs (KJ/Kg.°C)
 - $t_1 \rightarrow$ Temperatura d'entrada del fluid que circula per tubs(°C)
 - $t_2 \rightarrow$ Temperatura de sortida del fluid que circula per tubs (°C)
- Càlcul de DTML, abans s'ha de decidir el tipus de circulació, normalment s'escull en contracorrent per millorar el intercanvi de calor.

$$\Delta T_1(^{\circ}C) = T_2 - t_1$$

$$\Delta T_2(^{\circ}C) = T_2 - t_1$$

$$DTML(^{\circ}C) = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}} = 30,49$$

- Decisió del numero de passos per carcassa (nps) y per tubs (npt).

En la primera iteració es suposa que tant el número passos per carcassa com per tub és igual a 1.

- Correcció del DTML: (DTML)_c

$$(DTML)_c = DTML \cdot F = 29,88$$

F és un factor de correcció que s'avalua gràficament, és funció del número de passos per carcassa i per tubs i de les temperatures d'entrada i de sortida del bescanviador. Per un sol pas per tubs i per carcassa no s'ha de realitzar la correcció de DTML.

- Suposició del coeficient global inicial (U)

Es comença la iteració suposant un coeficient global de transferència U, per trobar aquest primer valor s'utilitza la Figura 11.32, que es troba en l'apartat dels kettle-reboiler.

- $U \rightarrow$ Coeficient global de transferència ($W/m^2 \cdot ^\circ C$).

- Càlcul de la superfície total d'intercanvi de calor

$$A = \frac{Q}{U \cdot (DTML)_c} = 40,60 \text{ m}^2$$

- $A \rightarrow$ Superfície d'intercanvi (m^2).

- Selecció de les característiques dels tubs

És fixen els valors més habituals:

- Diàmetre extern
- Espessor del tub
- Diàmetre intern $\rightarrow D_{\text{intern}} = D_{\text{extern}} - 2 \cdot \Delta x = 0,0186 \text{ m}$
- Longitud, per realitzar la unió amb el capçal és resta 0,025 m per cada costat. Per tant, la longitud efectiva es igual a la longitud menys els 0,05 m.

- Distribució dels tubs

S'ha escollit una distribució dels tubs de forma quadrada amb la finalitat de facilitar la neteja quan sigui necessària.

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

- Carcassa

El diàmetre de la carcassa correspon a l'espai que ha d'existir entre el feix de tubs i la paret externa de la carcassa, que depèn del tipus de carcassa seleccionada.

Es calcula el seu diàmetre en funció del diàmetre exterior, del número de tubs i dels paràmetres K y n que es llegeixen en taules segons el pitch i el nombre de passos per tubs.

$$D_b = D_{extern} \cdot \left(\frac{N_t}{K_1} \right)^{\frac{1}{n_1}} = 0,610 \text{ m}$$

$$N_t = K_1 \cdot \left(\frac{D_b}{D_{extern}} \right)^{n_1} = 147,46 \text{ s'arrodoneix a } 148$$

- $D_b \rightarrow$ Diàmetre del feix de tubs (m).
- $D_e \rightarrow$ Diàmetre extern (m).
- $N_t \rightarrow$ Número de tubs totals.
- K_1 i $n_1 \rightarrow$ constants tabulades en la **Taula 11.71**.

- o Càlcul de la superfície d'intercanvi de un tub (A_t).

$$A_t = \pi \cdot D_e \cdot L = 0,28 \text{ m}^2$$

En aquest punt es segueix el següent algorisme:

- Càlcul del nombre de tubs: $N_t = A / A_t$
- Càlcul de D_b per l'anterior N_t
- Càlcul del diàmetre de la carcassa: $D_s = D_b + (D_{IS} - D_b)$

On: $D_{IS} - D_b$ es troba tabulat.

Es comprova que D_s es trobi entre 150 i 1520mm i que la relació L/D_s estigui compresa entre 4 i 6.

- o Selecció del número de passos per tub npt mitjançant velocitats típiques.

➤ Àrea de pas per un tub:

$$A_{pas \text{ 1tub}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_i^2 = 1,43 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$$

➤ *Número de passos per tubs:*

$$v_t = \frac{m_t}{\ell \cdot A_{pas \text{ 1tub}} \cdot N_{tp}} = 1,04 \text{ m/s}$$

➤ *Velocitat per tubs:*

$$N_{tp} = \frac{N_t}{N_{pt}} = 18,5$$

Aquesta velocitat es troba dins del rang bibliogràfic per a líquids de procés per canonades, que se situen entre 1 i 2 m/s.

- Nombre de pantalles deflectors i separació entre elles.

$$\text{Baffle cut} = 25\%$$

L'espai entre pantalles (l_b) es recomana que estigui entre 0,2 i 1 cops el diàmetre de carcassa:

$$l_b = (0,2-1) \cdot D_s = 0,3126 \text{ m}$$

El nombre de pantalles deflectors es calcula mitjançant l'expressió:

$$N_{pantallas} = (L / l_b) - 1 = 11$$

- Correcció del valor de U del intercanviador.

$$A_{corregida} = \pi \cdot N_t \cdot L \cdot D_e = 41,33 \text{ m}^2$$

$$U = \frac{Q}{A \cdot (DTML)_c} = 687,49 \text{ W/m}^2 \cdot ^\circ\text{C}$$

- Determinació del U del intercanviador a partir dels càlculs dels coeficients individuals i factors de embrutiment.

Coeficient de convecció en el costat de tubs:

- Secció de pas:

$$A_{\text{pas1tub}} = \frac{\pi}{4} \cdot D_i^2 = 2,72 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$$

- L'àrea de pas de tots els tubs d'un mateix pas A_{past} , és pot calcular a partir de la següent expressió:

$$A_{\text{past}} = N_t \cdot \frac{A_{\text{pas1tub}}}{npt} = 5,027 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2$$

- Diàmetre equivalent del costat de tubs:

$$D_{\text{eq}} = D_i = 0,0186 \text{ m}$$

- Cabal màssic per unitat d'àrea (Densitat de flux màssic):

$$G_{\text{tub}} = \frac{m_t}{A_{\text{pas}_t}} = 1606,28 \text{ kg/m}^2\text{s}$$

- Càlcul dels números de Reynolds i Prandt:

$$\text{Re}_t = \frac{D_i \cdot G_{\text{tub}}}{\mu} = 1,04 \cdot 10^4$$

$$\text{Pr}_t = \frac{C_p \cdot \mu}{k} = 18,43$$

- Càlcul del coeficient individual de transmissió de calor en tubs

$$h_t = \frac{k}{D_i} \cdot j_h \cdot \text{Re} \cdot \text{Pr}^{0,33} \cdot \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0,14} = 2595,45 \text{ W/m}^2\text{°C}$$

- $j_h \rightarrow$ Factor de transferència pel fluid de tubs, és troba el seu valor mitjançant la figura 11.35 i es funció del Reynolds.

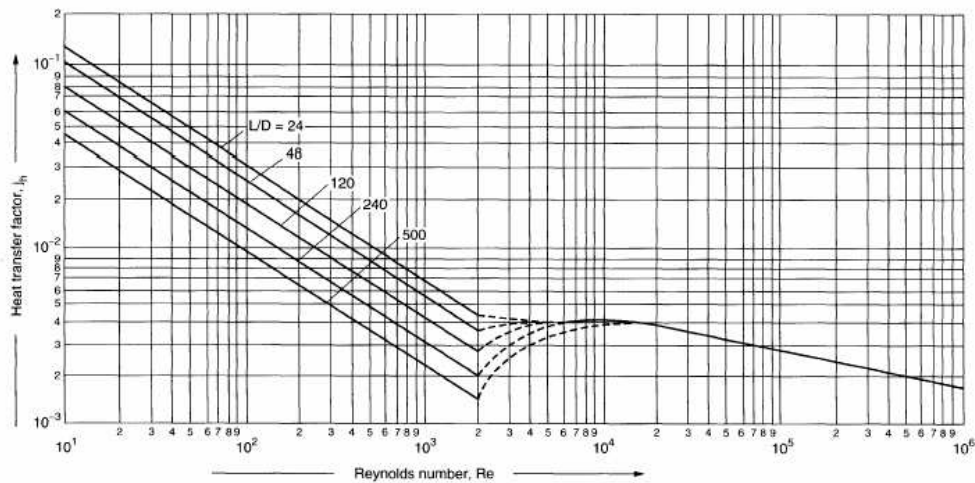


Figura 11.35.- Factor de transferència de calor pel fluid de tubs.

Coefficient de convecció en el costat de carcassa:

- Càlcul de l'àrea transversal de la carcassa A_{ST} :

$$A_{ST} = \frac{l_B \cdot D_s \cdot (\text{pitch} - D_e)}{\text{pitch} \cdot nps} = 3,91 \cdot 10^{-2} \text{ m}^2$$

- Càlcul del cabal màssic per unitat d'àrea i la velocitat per la carcassa:

$$G_s = \frac{M_s}{A_{ST}} = 259,36 \text{ kg/m}^2\text{s}; \quad v_s = \frac{M_s}{A_{ST} \cdot \ell_s} = 0,31 \text{ m/s}$$

Comprovem que aquesta velocitat està compresa en el rang de 0,3 i 1 m/s

- Càlcul del diàmetre equivalent de carcassa.

És funció de pitch, que en el nostre cas és quadrat:

$$D_{eq} = \frac{1,27}{D_e} (\text{pitch}^2 - 0,785 \cdot D_e^2) = 0,0251 \text{ m}$$

- Càlcul dels números de Reynolds i Prandt:

$$\text{Re}_s = \frac{D_{eq} \cdot M_s}{\mu_s} = 1,82 \cdot 10^4$$

$$\text{Pr}_s = \frac{C_{p_s} \cdot \mu_s}{k_s} = 2,23$$

➤ Càlcul del coeficient individual de transmissió de calor en carcassa:

$$h_s = \frac{k}{d_{eq}} \cdot j_h \cdot \text{Re} \cdot \text{Pr}^{0,33} \cdot \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0,14} = 3307,98 \text{ W/m}^2\text{C}$$

- $j_h \rightarrow$ Factor de transferència pel fluid de carcassa, és troba el seu valor mitjançant la Figura 11.36 i es funció del Reynolds.

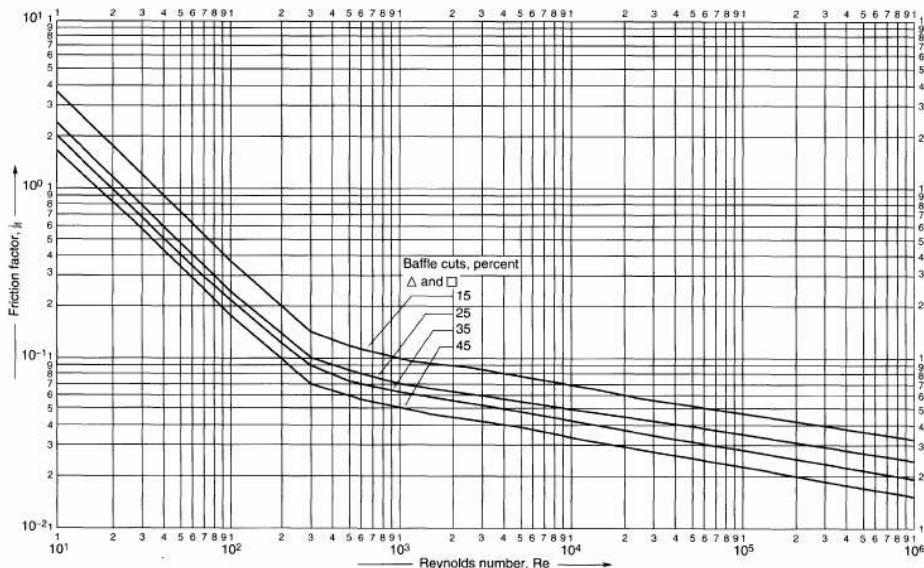


Figura 11.36.- Factor de transferència de calor pel fluid de carcassa

➤ Càlcul del coeficient global U a partir dels coeficients individuals.

En aquest cas U_r està referit a l'àrea externa.

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_s} + \frac{1}{R_s} + \frac{D_e \cdot \ln\left(\frac{D_e}{D_i}\right)}{2 \cdot k} + \frac{D_e}{D_i} \cdot \frac{1}{R_t} + \frac{D_e}{D_i} \cdot \frac{1}{h_t}$$

$$U = 719,62 \text{ W/m}^2\text{C}$$

Es compara aquest resultat amb el valor suposat inicialment i en cas que el error sigui superior o inferior al 15% es torna a iterar.

➤ *Càlcul de les pèrdues de pressió.*

Per tubs:

$$\Delta P_t = N_{pt} \cdot \left[8 \cdot j_f \cdot \frac{L}{D_i} + 2,5 \right] \cdot \frac{\ell \cdot v_t^2}{2} = 57,38 \text{ KN/m}^2$$

El valor de ΔP_t no pot superar 50-70 KN/m².

- $\Delta P_t \rightarrow$ Pèrdua de carrega per tubs (N/m²).
- $j_f \rightarrow$ Factor de fricció pel fluid de tubs, és troba el seu valor mitjançant la figura 11.33 i es funció del Reynolds.

En la carcassa:

$$\Delta P_s = nps \cdot 8 \cdot j_f \cdot \left(\frac{D_e}{D_{eq}} \right) \cdot \left(\frac{L}{l_B} \right) \cdot \left(\frac{\ell_s \cdot v_s^2}{2} \right) = 3,61 \text{ KN/m}^2$$

El valor de ΔP_s no pot superar 35 KN/m².

- $\Delta P_s \rightarrow$ Pèrdua de carrega per tubs (N/m²).
- $j_f \rightarrow$ Factor de fricció pel fluid de carcassa, és troba el seu valor mitjançant la Figura 11.34 i es funció del Reynolds.

11.13 INTERCANVIADORS DE CALOR DE DOBLE TUB (E-601/602, E-801/803)

L'esquema d'aquest equip es presenta a continuació, els números son del E-602 la resta seguiran la mateixa metòdica de càlcul:



Figura 11.37.- Bescanviador de doble tub.

A continuació és planteja el esquema de càlcul per el disseny de intercambiadors de doble tub de la planta. Se segueixen els següents passos per dissenyar els bescanviadors de doble tub extrets de la bibliografia. Cal recordar que en aquest cas el fluid que refreda va pel tub anular i el fluid calent per tub.

Quan l'àrea de bescanvi necessària sigui menor a 10m^2 i en aquests casos la bibliografia aconsella l'ús d'un intercambiador anul·lar.

Les propietats dels corrents s'han trobat mitjançant els paquets termodinàmics del programa HYSYS, i venen resumits a la següent taula:

Taula 11.76.- Propietats físiques dels corrents d'entrada i sortida al E-602.

Propietats	Tubs interns (procés)		Tubs exteriors (aigua)	
	ENTRADA	SORTIDA	ENTRADA	SORTIDA
Fase	L	L	L	L
Temperatura (°C)	93	40	30	45
Pressió ((bar))	1,01325	1,01325	1,01325	1,01325
Cabal màssic (kg/h)	2512,70	2513,69	5407,58	5406,81
Densitat (kg/m ³)	1046	1091	995,6	990,2
Viscositat (kg/ms)	5,78E-03	1,17E-02	7,97E-04	6,00E-04
Cp (kJ/kg°C)	2,545	2,544	4,1784	4,179
Conductivitat (W/m°C)	0,3091	0,3026	0,575	0,56

El cabal d'entrada del fluid de procés és sobredimensiona un 25%, perquè el fluid tèrmic o el refrigerant sigui capaç de transferir o endur-se més calor i així s'assegura el bescanvi desitjat

Abans de inicial el mètode de càlcul és decideix el diàmetre extern, el gruix dels dos tubs i amb aquests és calcula el diàmetre intern.

- Balanç tèrmic.

Per a la decisió del fluid que circularà per el tub interior i del que circularà per el tub anular, el fluid més calent circularà per tubs circulant l'altre per el tub anular.

- Càlcul del calor a intercanviar i del cabal de fluid refrigerant necessari

En el cas que és reutilitzen corrents per aprofitar que una s'escalfa i l'altre és refreda s'ha de jugar amb les temperatures de sortida del fluid calent, perquè els dos fluid donin el mateix calor, ja que els cabals, els calors específics i la temperatura d'entrada estan definides.

El rang de la temperatura de sortida, en els dos casos que és fa reprofitament, és alt ja que el fluid calent entra a un cristal·litzador que està a 15°C i la temperatura de sortida serà la que doni el calor a bescanviar que necessiti el fluid fred, no ha de ser un temperatura concreta sinó que s'ha de baixar una mica la temperatura abans d'entrar al cristal·litzador.

$$Q = m_t \cdot Cp_t \cdot (T_1 - T_2) = m_a \cdot Cp_a \cdot (t_2 - t_1) = 338925,74 \text{ KJ/h}$$

- $Q \rightarrow$ Calor a intercanviar (KJ/h)
- $m_t \rightarrow$ Cabal que circula per el tub interior (Kg/h)
- $Cp_t \rightarrow$ Calor específic de la mescla que circula per el tub interior (KJ/Kg·°C)
- $T_1 \rightarrow$ Temperatura d'entrada del fluid que circula per el tub interior (°C)
- $T_2 \rightarrow$ Temperatura de sortida del fluid que circula per el tub interior (°C)
- $m_a \rightarrow$ Cabal que circula per el tub anular (Kg/h)
- $Cp_a \rightarrow$ Calor específic de la mescla que circula per el tub anular (KJ/Kg·°C)
- $t_1 \rightarrow$ Temperatura d'entrada del fluid que circula per el tub anular (°C)
- $t_2 \rightarrow$ Temperatura de sortida del fluid que circula per el tub anular (°C)

- Càlcul de DTML, abans s'ha de decidir el tipus de circulació, normalment s'escull en contracorrent per millorar el intercanvi de calor.

$$\Delta T_1(^{\circ}C) = T_2 - t_1$$

$$\Delta T_2(^{\circ}C) = T_2 - t_1$$

$$DTML(^{\circ}C) = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}} = 24,23$$

- A partir del diàmetre intern de la canonada per la que circula el fluid intern és calcula la seva velocitat:

$$A_{tub} = \left(\frac{\pi}{4} \cdot D_i^2 \right) = 4,516 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$$

$$Q_L = \frac{m_i}{\ell_i} = 6,53 \cdot 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$$

$$v = \frac{Q_L}{A_{tub}} = 1,44 \text{ m/s}$$

- $A_{tub} \rightarrow$ Àrea d'un tub (m^2).
- $Q_L \rightarrow$ Cabal volumètric que circula per dins el tub interior (m^3/s).
- $m_i \rightarrow$ Cabal màssic que circula per dins el tub interior (kg/s).
- $\ell_i \rightarrow$ Densitat de la mescla (Kg/m^3).
- $v \rightarrow$ Velocitat del fluid dins els tubs (m/s).

Fixarem un diàmetre exterior per el tub interior, de manera que la velocitat estigui en el rang típic d'1 a 2 m / s.

- Càlcul de hi:

Aquest valor es calcula a partir del Reynolds, Prandlt i Nusselt, així doncs:

$$\text{Re} = \frac{\ell \cdot v \cdot D_i}{\mu} = 4,41 \cdot 10^3; \quad \text{Pr} = \frac{C_p \cdot \mu}{k} = 69,95$$

$$\text{Nu} = 0,027 \cdot \text{Re}^{0,8} \cdot \text{Pr}^n = 79,48; \quad h_i = \frac{\text{Nu} \cdot k}{D_i} = 1013,62 \text{ W/m}^2\text{C}$$

On:

- *n val 0,3 per líquids que es refreden i 0,4 per líquids que s'escalfen.*
- En el cas del tub anular els càlculs van referits al diàmetre equivalent (D_{eq}).

$$D_{eq} = (D_{intern \text{ anular}} - D_{extern \text{ tub}}) \cdot 32 \text{ mm}$$

- A partir del diàmetre equivalent de la canonada per la que circula el fluid extern és calcula la seva velocitat:

$$A_{tub} = \left(\frac{\pi}{4} \cdot D_{eq}^2 \right) = 8,04 \cdot 10^{-4} \text{ m}^2$$

$$Q_L = \frac{m_e}{\ell_e} = 1,51 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$$

$$v = \frac{Q_L}{A_{tub}} = 1,88 \text{ m/s}$$

- $A_{tub} \rightarrow$ Àrea d'un tub (m^2).
- $Q_L \rightarrow$ Cabal volumètric que circula per dins el tub interior (m^3/s).
- $m_e \rightarrow$ Cabal màssic que circula per dins el tub interior (kg/s).
- $\ell_e \rightarrow$ Densitat de la mescla (Kg/m^3).
- $v \rightarrow$ Velocitat del fluid dins els tubs (m/s).

Fixarem un diàmetre equivalent modificant el diàmetre intern anular per el tub exterior, de manera que la velocitat estigui en el rang típic d'1 a 2 m / s.

- Càlcul de he:

Aquest valor es calcula a partir del Reynolds, Prandtl i Nusselt, així doncs:

$$\text{Re} = \frac{\ell \cdot v \cdot D_{eq}}{\mu} = 8,61 \cdot 10^4 ; \quad \text{Pr} = \frac{C_p \cdot \mu}{k} = 5,11$$

$$\text{Nu} = 0,027 \cdot \text{Re}^{0,8} \cdot \text{Pr}^n = 460,09; \quad h_e = \frac{\text{Nu} \cdot k}{D_{eq}} = 8158,93 \text{ W/m}^2\text{°C}$$

On:

- *n val 0,3 per líquids que es refreden i 0,4 per líquids que s'escalfen.*

- Càlcul de coeficient global de transferència de calor.

És calcula mitjançant la següent equació:

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_i} + \frac{\Delta x}{k \cdot \frac{D_{ml}}{D_i}} + \frac{1}{h_e \cdot \frac{D_e}{D_u}} = 894,75 \text{ W/m}^2\text{°C}$$

- *U → Coeficient global de transferència de calor (W/m²·°C).*
- *hi → Coeficient individual de transmissió de calor del fluid calent (W/m²·°C).*
- *he → Coeficient individual de transmissió de calor del fluid fred (W/m²·°C).*
- *Δx → Gruix de la paret de separació entre els dos fluids (m).*
- *k → Conductivitat tèrmica de la paret de separació entre els dos fluids (W/m·°C).*
- *Di → Diàmetre intern del tub (m)*
- *De → Diàmetre extern del tub (m)*
- *Dml → Diàmetre mitja logarítmic entre De i Di, es calcula de següent manera:*

$$D_{ml} = \frac{D_e - D_i}{\ln \frac{D_e}{D_i}} = 24,68 \text{ mm}$$

- L'àrea necessària pel bescanvi és calcula a partir de la següent equació:

$$A(m^2) = \frac{Q}{U \cdot (DTML)} = 4,34$$

- La longitud del cilindre vindrà determinada per l'àrea de contacte necessària que es requereixi, per tant:

$$L(m) = \frac{A}{\pi \cdot D_e} = 54,43 \text{ s'arrodoneix a } 55 \text{ m}$$

- Per a la determinació de les pèrdues de càrrega es fa ús de les següents equacions:

- Per tub intern:

$$G \left(\frac{kg}{h \cdot m^2} \right) = \frac{m_t}{A_{tub}}$$

- Primerament apliquem l'equació de fanning, canviant de unitats a unitats angleses els valors ja calculats per utilitzar les següents equacions.

$$\Delta F_t = \frac{4 \cdot f \cdot G^2 \cdot L}{2 \cdot g \cdot \ell^2 \cdot D_i}$$

- $\Delta F_t \rightarrow$ Coeficient global de transferència de calor (peus).
- $f \rightarrow$ f de fanning, valor que s'extreu de la figura 11.38.
- $G \rightarrow$ Velocitat màssica (lb/peu²·h).
- $L \rightarrow$ Longitud del tub (peu).
- $g \rightarrow$ Gravetat (peu/s²).
- $\ell \rightarrow$ Densitat del fluid que circula per el tub interior (lb/peu³)
- $D_i \rightarrow$ Diàmetre intern del tub (m)

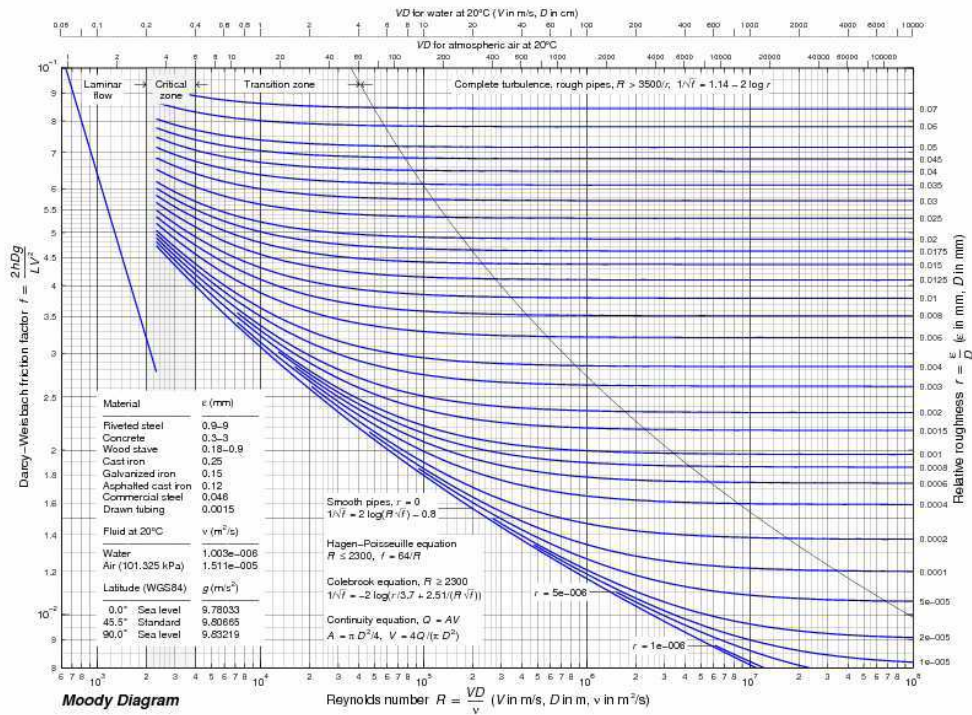


Figura 11.38.- Diagrama de Moody

- Càlcul de la caiguda de pressió de per la forquilla:

$$v = \frac{G}{\ell \cdot 3600}$$

$$F_t \text{ (peus)} = 3 \cdot \left(\frac{v^2}{2 \cdot g'} \right); \text{ on } g' \text{ té un valor de } 32.2 \text{ peus/s}^2$$

- Càlcul de pèrdues de càrrega

$$\Delta P \text{ (lb / plg}^2) = \frac{(\Delta F_t + F_t) \cdot \ell}{144}$$

Un cop obtingut el valor de les pèrdues de càrrega fem el canvi d'unitats al sistema internacional a N/m² i aquest valor no pot estar per sobre de 478,8N/m².

- Per tub anular

El càlcul és equivalent al del tub intern, però el diàmetre utilitzat és el diàmetre equivalent ($D_{\text{intern anular}} - D_{\text{externo tub}}$). El valor d'aquestes pèrdues de pressió màximes també són iguals a $478,8\text{N/m}^2$.

11.14 SEPARADOR DE FASES (S-502)

La funció d'aquest separador de fases es separa la fase aquosa (aigua) i la fase orgànica (pentà). Per dissenyar-ho s'utilitzarà el mètode de Hooper i Jacobs que a continuació s'especifica.

- **Dimensions del separador:**

$$u_d = \frac{d_d^2 \cdot g \cdot (\ell_c - \ell_d)}{18 \cdot \mu_c} = 2,50 \cdot 10^{-3} \text{ m/s}$$

- $u_d \rightarrow$ Velocitat terminal de les gotes de la fase orgànica con diàmetre d_d (m/s).
- $d_d^2 \rightarrow$ Diàmetre de una gota ($150 \cdot 10^{-6} \text{ m}$).
- $g \rightarrow$ Acceleració gravitacional (m/s^2).
- $\ell_d \rightarrow$ Densitat de la fase orgànica (Kg/m^3).
- $\ell_c \rightarrow$ Densitat de la fase aquosa (Kg/m^3).
- $\mu_c \rightarrow$ Viscositat de la fase aquosa ($\text{Kg/m}\cdot\text{s}$).

De la següent equació es té dues incògnites, u_c i A_i , de forma que se suposa que $u_c > u_d$, i s'extraurà un valor de àrea interfacial sobredimensionada.

$$A_i = \frac{L_c}{u_c} \rightarrow \frac{L_c}{u_d} = 0,5341 \text{ m}^2$$

- $u_d \rightarrow$ Velocitat terminal de les gotes de la fase aquosa (m/s).
- $L_c \rightarrow$ Cabal volumètric de la fase aquosa (m^3/s).
- $A_i \rightarrow$ àrea interfacial (m^2).

Per determinar l'altura del tanc, primer es calcula el radi de la següent manera:

$$r = \sqrt{\frac{A_i}{\pi}} = 0,41 \text{ m}; \quad h = 2 \cdot D = 2,47 \text{ m}$$

- $r \rightarrow$ Radi del tanc (m).
- $h \rightarrow$ Altura del tanc (m).
- $d \rightarrow$ Diàmetre del tanc (m).

La fase de dispersió és determina com el 20% de l'altura del cilindre, es calcularia com:

$$h_{\text{fase dispersa}} = 0,2 \cdot h = 0,49$$

Finalment es calcular el temps de residència de les gotes en la interfase que es diferent al temps de residència del tanc.

$$\zeta = h_{\text{fase dispersa}} / u_d = 197,87 \text{ s}$$

- $\zeta \rightarrow$ temps de residència de les gotes en la interfase (s).

La bibliografia recomana uns temps de residència d'interfase de entre 2 i 6 minuts per afirmar que el separador és viable.

Cal remarcar que finalment el diàmetre i l'alçada escollida es variar en cert grau per facilitar el disseny utilitzant mesures comercials.

11.15 DISSENY DELS TANCOS D'EMMAGATZEMATGE DE PRODUCTES I SUBPRODUCTES

11.15.1 Disseny de la sitja de paracetamol.

A continuació es poden observar les taules amb les dades principals del disseny de la sitja del paracetamol. Els càlculs que s'han realitzat per a obtenir les dades finals de disseny es poden trobar d'una forma més detallada a l'apartat 11.1.8 *Disseny de tancos d'emmagatzematge de productes sòlids* del present manual de càlcul. El paracetamol produït a la planta s'emmagatzema primerament en sitges i posteriorment en bosses de 25kg que aniran en bidons de cartró. El transport des de la sitja fins a les bosses s'anirà fent a demanda i mitjançant una màquina transportadora-ensasadora que se situarà just a sota de la sitja d'emmagatzematge de producte sòlid. Per a saber la quantitat de bidons que es produeixen a diari es realitza el següent càlcul:

$$24480 \frac{\text{KgAPAP}}{\text{dia}} \cdot \frac{1 \text{cilindre}}{25\text{Kg}} = 979 \frac{\text{cilindres}}{\text{dia}}$$

Aquest és el nombre de bidons que s'omplen en un dia de producció. A continuació s'esmenten els principals paràmetres de la sitja:

Taula 11.77.- *Dimensions de la sitja d'emmagatzematge de paracetamol*

Paràmetres	Valors
Diàmetre part cilíndrica (m)	2,3
Alçada part cilíndrica (m)	5,63
Volum part cilíndrica (m ³)	23,42
Diàmetre superior part cònica (m)	0,3
Alçada part cònica (m)	0,53
Volum part cònica (m ³)	0,74
Volum tolva (m ³)	0,91
Alçada tolva (m)	0,58

També es pot veure el disseny mecànic del recipient:

Taula 11.78.- Disseny mecànic de la sitja d'emmagatzematge de paracetamol

Paràmetres	Valors
Gruix del capçal superior (mm)	4
Gruix de la part cilíndrica (mm)	5
Gruix de la part cònica (mm)	6
Pes de la tolva (Kg)	107,81
Pes de la part cilíndrica (Kg)	1612,2
Pes de la part cònica (Kg)	40,89

11.15.2 Disseny dels tancs d'emmagatzematge d'àcid acètic al 65%.

L'àcid acètic és un subproducte del procés de producció. Aquest àcid és el producte de la mescla de dos corrents segregats a la planta. Un d'ells és l'acètic al 36% que s'obté de la columna de rectificació C-701. L'altre és l'acètic condensat que s'extreu dels vapors de sortida dels assecadors al buit de paracetamol (AB-801/802). La barreja d'aquests dos corrents ens permeten poder vendre un subproducte de molt bona qualitat.

L'emmagatzematge d'aquest subproducte es fa a la mateixa àrea d'emmagatzematge de producte final (A-900) i en un tanc de 25m³ de capacitat. El cabal recollit al tanc és de 24,84 m³/dia. Dos cisternes de 15 m³ vindran a la planta cada dia per recollir el subproducte generat

Les dimensions dels tancs es poden veure a la Taula 11.79.

Taula 11.79.- Disseny funcional del tanc d'emmagatzematge d'acètic al 65%

Paràmetres	Valors
Diàmetre (m)	2,2
Alçada del tanc (m)	6,58
Alçada del líquid (m)	6,53
Volum ocupat (%)	95

Els capçals del tanc són plans degut a que es treballa a una temperatura de 25°C, llavors l'estat de l'àcid acètic és líquid. A continuació s'esmenten diferents dades d'interès de la mescla:

Taula 11.80.- *Condicions de treball del tanc d'emmagatzematge*

Paràmetres	Valors
Densitat (Kg/m ³)	1017
ΔP (atm)	0,64
Pressió de disseny (atm)	1,89
Temperatura de disseny (°C)	28,75

La segona columna de la taula anterior és la pressió exercida per l'alçada del líquid al tanc, aquests càlculs estan més detallats al disseny del tanc d'emmagatzematge del fenol.

El material que es fa servir al disseny del tanc és AISI-316 amb els següents gruixos:

Taula 11.81.- *Gruixos de les diferents parts del tanc d'emmagatzematge*

Gruixos	Valors
Part cilíndrica (mm)	3,88→5
Capçal superior semiesfèric (mm)	2,86→4
Capçal inferior pla (mm)	8

Per calcular els diferents gruixos del tanc es fa servir la normativa ASME.

- C_1 : Marge de corrosió (1,5mm).
- C_2 : Marge de tolerància (1mm).
- S : Esforç del material (1772,45 atm).
- E : Radiografiat parcial (0,85).

Per últim, es calcula el pes del reactor. Per a obtenir aquesta dada, s'utilitza la densitat del AISI-316 que és 7980 Kg/m^3 . Es calcula el pes de l'equip buit i també amb el fluid d'operació.

Taula 11.82.- Disseny mecànic del tanc d'emmagatzematge d'àcid acètic al 65%

Paràmetres	Valors
Part cilíndrica (Kg)	2182,29
Capçal superior (Kg)	304,73
Capçal inferior (Kg)	242,68
Pes total buit (Kg)	2729,7
Pes total+fluid (Kg)	28006,4

11.16 DISSENY D'EQUIPS DE SERVEI

Una vegada calculades les necessitats de fluid de servei per els diferents equips (mitja canya dels cristal·litzadors, serpentins dels reactors, equips de bescanvi de calor, etc...) es poden calcular les potències dels equips de refrigeració:

Tenim diferents línies de fluid de serveis:

- 2 d'aigua descalcificada, que circulen a 5°C i a 15°C .
- 1 d'aigua glicolada, que circula a -15°C
- 2 de vapor d'aigua, que circulen a 120°C i a 150°C hi ha 5atm
- 1 d'aigua sobreescalfada a 90°C

Aquestes línies de serveis són tancades. El fluid que s'utilitza per refrigerar, després s'envia a la torre de refrigeració per baixar fins a 25°C i posteriorment passa a través d'un equip de fred per baixar la temperatura fins la desitjada i reutilitzar-la en els diferents equips.

De la mateixa manera es tracta el vapor, un cop utilitzat es recull el condensat i a continuació torna a la caldera, on es torna a formar el vapor. Igualment amb el aigua sobreescalfada.

Degut a que les línies operen a diferents temperatures, s'ha decidit utilitzar un equip de refrigeració o calefacció per cada línia de fluid de servei. Per tant, disposarem d'una torre de refrigeració, tres calderes, cinc chillers.

Aquests equips es poden adquirir en empreses especialitzades a partir de la potencia necessària. Aquesta potencia és calcula com:

$$P(KW) = m_{fluid\ servei} \cdot Cp_{fluid\ servei} \cdot \Delta T_{fluid\ servei} + m_{fluid\ servei} \cdot \lambda_{fluid\ servei}$$

11.16.1 Grup de fred per l'aigua glicolada

En la planta és disposa d'un circuit d'aigua glicolada amb un 40% de glicol a -15°C per refredar diferents equips. De mitjana tornarà al chiller a -8°C per tant el salt tèrmic serà de 7°C. La potencia frigorífica del grup de fred és calcula com:

$$Q(KW) = m \cdot Cp \cdot \Delta T = \frac{57,01Kg}{s} \cdot \frac{3,747KJ}{Kg \cdot ^\circ C} \cdot 7^\circ C = 1317,67KW$$

Les unitats refredadores d'aigua glicolada és la EWYD 1530.3 de la casa HITECSA, amb una potencia frigorífica de 1525 KW. Aquest paràmetre ha de modificar-se ja que esta calculat per aigua pura, els factors de correcció és mostren a la següent taula:

Taula 11.82.- Factors de correcció pel càlcul de la potència frigorífica real

Percentatge de glicol	40%
Temperatura de congelació (°C)	-22,3
Coef. correctiu potencia frigorífica	0.966
Coef. correctiu potencia absorbida	0,985
Coef. correctiu flux de mescla	1,14
Coef. Correctiu caiguda de pressió	1,244

Per tant per l'aigua glicolada, la potencia frigorífica real, pels dos equips de refrigeració que es tenen a planta, serà de 1473KW i poden tractar 117 m³/h cadascun d'ells, per aquesta raó tenim dos perquè tenim més cabal.

11.16.2 Torre de refrigeració

El circuit de torre proporciona aigua de refrigeració a 25°C, per després enviar als chillers per baixar-la uns a 15°C i una altre a 5°C. Ens permet un salt tèrmic de uns 20°C com a màxim.

La potencia de refrigeració que requereix aquesta corrent a la planta és la següent:

$$Q(KW) = m \cdot Cp \cdot \Delta T = \frac{75,25Kg}{s} \cdot \frac{4,18KJ}{Kg \cdot ^\circ C} \cdot 20^\circ C = 6290,61KW$$

Per dissipar aquesta potencia s'utilitza una torre de refrigeració EWB 4600, amb una capacitat de dissipar 7355 KW.

11.16.3 Chiller per aigua descalcificada

Les necessitat d'aigua de refrigeració per aquesta planta són a 15°C pels diferents bescanviadors de la planta i a 5°C per el R-701.

Les potencies de refrigeració que requereix aquestes corrents a la planta són les següents:

$$Q_{15^\circ C}(KW) = m \cdot Cp \cdot \Delta T = \frac{57,86Kg}{s} \cdot \frac{4,18KJ}{Kg \cdot ^\circ C} \cdot 10^\circ C = 2418,33KW$$

$$Q_{5^\circ C}(KW) = m \cdot Cp \cdot \Delta T = \frac{6,9Kg}{s} \cdot \frac{4,18KJ}{Kg \cdot ^\circ C} \cdot 20^\circ C = 461,47KW$$

Les unitats refredadores d'aigua fins a 15°C, seran dues EWYD 1530.3 de la casa HITECSA, amb una potencia frigorífica de 1525 KW.

La unitat refredadora d'aigua fins a 5°C, serà la EWYD 470,2 també de la casa HITECSA, amb una potencia frigorífica de 474 KW.

11.16.4 Consum d'energia elèctrica

Per dimensionar les línies s'utilitzarà la següent equació:

$$I = \frac{P}{\sqrt{3} \cdot \cos \phi \cdot V}$$

on:

- $P \rightarrow$ potència requerida (W)
- $I \rightarrow$ intensitat de la caiguda de cada línia (A)
- $V \rightarrow$ voltatge (380 V)
- $\cos \phi \rightarrow 0,8$

Un cop coneguda la intensitat es fa us de la següent equació per determinar la secció:

$$e = \frac{1,73 \cdot L \cdot I \cdot \cos \phi}{K \cdot S}$$

on:

- $e \rightarrow$ caiguda de la tensió (A)
- $L \rightarrow$ longitud dels cable (m)
- $S \rightarrow$ secció de línia
- $K \rightarrow$ constant del material (56 en el cas del coure)

Es poden veure els resultats d'aquests càlculs a l'apartat 1.8.8 de les especificacions del projecte.

11.17 CÀLCUL DE BOMBES I COMPRESSORS

11.17.1 Bombes

Per ajudar a la circulació dels fluids per les canonades s'usen bombes. Totes les bombes que usarem seran bombes centrífugues.

A continuació és presenta l'esquema de càlcul a seguir per escollir en cada cas el tipus de bomba a utilitzar a partir de les especificacions d'aquesta.

- **Balanç d'energia mecànica**

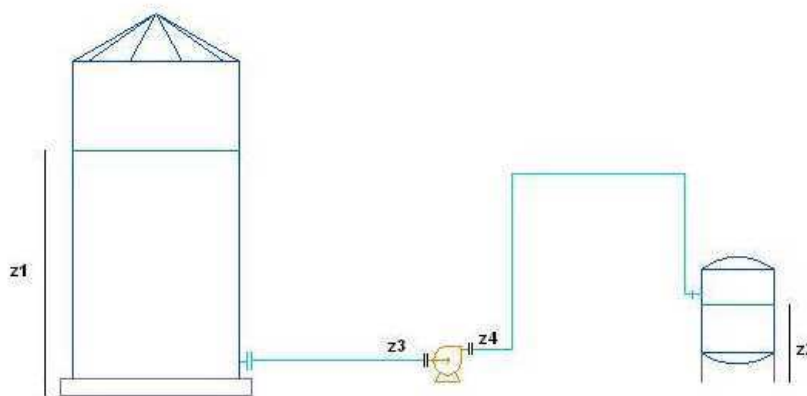


Figura 11.39.- Esquema de la zona a estudiar

$$g \cdot (z_2 - z_1) + \frac{(P_2 - P_1)}{\ell} + \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{v_2^2}{\alpha_2} - \frac{v_1^2}{\alpha_1} \right) + e_v = W$$

- $g \rightarrow$ gravetat = $9,8 \text{ (m/s}^2\text{)}$
- z_2 i $z_1 \rightarrow$ altura del líquid en les posicions 1 i 2 (m)
- P_1 i $P_2 \rightarrow$ pressió en el punt 1 i 2 (Pa)
- $\ell \rightarrow$ densitat del líquid (Kg/m^3)
- v_1 i $v_2 \rightarrow$ velocitats del fluid en el punt 1 i 2 (m/s)
- α_2 i $\alpha_1 \rightarrow$ si $Re < 2100$ $\alpha = 0,5$, si $Re > 4000$ $\alpha = 1$
- $e_v \rightarrow$ pèrdues d'energia mecànica (m^2/s^2)
- $W \rightarrow$ energia aportada al sistema (m^2/s^2)

- **Pèrdues d'energia mecànica per fricció**

Les pèrdues d'energia mecànica en la conducció són degudes a la fricció del fluid amb la canonada. Però el càlcul serà diferent per als trams rectes i accidents.

$$e_v = e_{v(\text{trams rectes})} + e_{v(\text{accidents})}$$

Les pèrdues per fricció en els trams rectes és calculen amb l'equació de Fanning.

$$e_{v(\text{trams rectes})} = 2 \cdot f \cdot v^2 \cdot \frac{L}{D}$$

I en els accidents és calculen mitjançant la següent equació:

$$e_{v(\text{accidents})} = \sum K \cdot \frac{v^2}{2}$$

- $F \rightarrow$ factor de fricció, és troba a partir del diagrama de moody (**Figura 11.38**)
- $v \rightarrow$ velocitat del fluid (m/s)
- $L \rightarrow$ longitud de la canonada (m)
- $D \rightarrow$ diàmetre de la canonada (m)
- $K \rightarrow$ constant característica de cada tipus d'accident

- **Càrrega total**

La càrrega total és la diferència entre la càrrega total necessària en la impulsió i en la aspiració.

$$h = h_i - h_a$$

$$h_i = (z_2 - z_4) + \frac{1}{g} \cdot \left(\frac{P_1}{\ell} + \frac{v_1^2}{2 \cdot \alpha} + e_{vi} \right)$$

$$h_a = (z_1 - z_3) + \frac{1}{g} \cdot \left(\frac{P_2}{\ell} + \frac{v_2^2}{2 \cdot \alpha} - e_{va} \right)$$

on:

- $e_{va} \rightarrow$ pèrdues d'energia mecànica en el tram d'aspiració (m^2/s^2)
- $e_{vi} \rightarrow$ pèrdues d'energia mecànica en el tram d'impulsió (m^2/s^2)

h són els metres que el fluid podrà pujar gracies a la seva energia mecànica. Si el seu valor es negatiu, el sistema no requerirà aportació externa d'energia, però si és positiu serà necessari la instal·lació d'una bomba per aportar l'energia requerida per el sistema.

- **Potència de la bomba**

Per calcular la potencia necessària de la bomba ($P=J/s$) per impulsar el fluid s'utilitza la següent equació:

$$P = W \cdot m$$

- $W \rightarrow$ energia aportada al sistema (m^2/s^2)
- $m \rightarrow$ cabal màssic (K/gs)

La potència real de la bomba es calcula a partir d'un rendiment (η) d'aquesta, donat pel fabricant, i de la potència necessària calculada anteriorment.

$$P_{real} = \frac{P}{\eta}$$

- **NPSH disponible**

El NPSH és un factor important a tenir en compte, ja que si la pressió disminueix per sota de la pressió de vapor aquest pot vaporitzar i produir el fenomen de cavitació.

$$NPSH_{disponible} = h_a \cdot \frac{P_v}{\ell \cdot g}$$

El NPSH disponible haurà de ser més gran que el requerit almenys en un 10%.

11.17.2 Compressors

Per a fer el càlcul de la potència que necessita un compressor es necessita saber el rendiment màxim que pot assolir per a una certa relació de pressions i de temperatures. A continuació es dona a conèixer la fórmula mitjançant la qual es realitza aquest càlcul:

$$\eta = \left(\left[\frac{P_b}{P_a} \right]^{\frac{2}{7}} - 1 \right) \cdot \left[\frac{T_2}{T_1 - 1} \right]^{-1}$$

on:

- T_2 .- temperatura del gas a la sortida del compressor (70 °C)
- T_1 .- temperatura del gas a l'entrada del compressor (25 °C)
- P_b/P_a .- relació de compressió entre pressió a la sortida i a l'entrada del compressor

Amb el rendiment que resulta d'aquesta compressió es pot saber la potència necessària que ha de tenir el compressor:

$$\bar{W} = \frac{\gamma}{(\gamma - 1) \cdot \eta} \cdot \frac{zRT}{PM} \left[\left(\frac{P_b}{P_a} \right)^{1 - \frac{1}{\gamma}} - 1 \right]$$

on:

- T .- temperatura d'entrada del gas, °C
- γ .- relació dels calors específics (C_p/C_v)
- P_b/P_a .- relació de compressió entre pressió a la sortida i a l'entrada del compressor
- z .- factor de compressibilitat del gas
- R .- constant dels gasos (8,314kJ/kmol)
- PM .- pes molecular del gas
- W .- potència del compressor per unitat màssica (kJ/kg)

Amb la potència màssica del reactor i el cabal màssic que ha de comprimir es pot saber la potència final de l'equip: $W = \bar{W} \cdot Q_{\text{màssic}}$

12. BIBLIOGRAFIA

Procés general

- M. Tuttle, *Acetaminophen*, Ullmann's Enciclopedia of Industrial chemistry, 6ª edició (2002)
- N.J, Hoboken, Kirk-Othmer Enciclopedia of Chemical Technology, 4th Edition (2004)
- Prosser, T. J. et al, *Preparation of p-nitrophenols*, USPatent 3510527 (1970)
- Harvey, F. et al, *Nitration process for phenolic compounds*, USPatent 3519693 (1970)
- Pascal Metivier, L. et al, *Preparation of p-nitrophenolic compounds*, USPatent 5414148 (1995)
- Isere, A.P et al, *Process for the purification of para-nitrophenol*, USPatent 3954892 (1976)
- A. Foster, James et al, *Process for preparing acyl aminophenols*, USPatents 5648535 (1997)

Equips de procés

- Baquero, J., Llorente V., *Equipos para la industria química y alimentaria*. Editorial Alambra S.A.
- Coulson, J.M., Richardson, J.F., *Chemical Engineering, Volume 6, Design*, R. K. Sinnott, Pergamon Press, 1983, 1ª edició.
- Eugene F. Megyesy, *Manual de recipientes a presión. Diseño y cálculo*, Editorial Limusa, Noriega editores, 2001, 7ª edició.
- Magyesy, E., *Manual de Recipientes a Presión*, Ed. Limusa, 2001
- Perry, R.H., *Perry's Chemical Engineering Handbook*, Mc Graw Hill, 1974
- E.L. Paul, *Handbook of Industrial Mixing: Science and Practice*, John Wiley & Sons (2004)

- P. Trambouze, H. Van Landeghem, J. P. Wauquier, *Chemical Reactors: Design, engineering, operation*”, Ed. Technip, 1988
- Ketan D. Samant i Lionel O’Young, *Understanding Crystallization and Crystallizers*.
- A. Mermann, *Crystallization Technology Handbook*, Second edition.
- P. Martínez de la Cuesta, *Operaciones de separación en ingeniería química*, Prentice Hall, 2004.
- C. Branan, *Rules of thumb for chemical engineers*, ELSEVIER, 4ª edició, 2005
- Pàgina web de l’empresa Goodfellow, www.goodfellow.com on es poden consultar les diferents propietats dels acers empleats.
- Pàgina web de la empresa Haynes, www.haynesintl.com on es poden consultar les propietats del material Hastelloy.
- Pàgina web: www.directindustry.com , on es poden consultar diferents empreses per buscar equips necessàries.

Bescanviadors de calor

- Donald Q. Kern, *Procesos de transferencia de calor*, Editorial CECSA, 2004, 35ª edición.
- McAdams, M.H., *Heat transmission*, 3ª ed., McGraw-Hill Book Company, New York, 1954
- Kenneth J. Mc Naughton *The chemical Engineering Guide to Heat Transfer*, volume 1: Plant Principles

Control i instrumentació

- Stephanopoulos, G.; *Chemical Process Control: An Introduction to Theory and Practice*, Prentice Hall, New Jersey, 1984
- Ollero de Castro, P.; Fernández, E.; *Control e instrumentación de procesos químicos*, Síntesis, Madrid, 1998

- Seborg, D.E.; Edgar, T.; Mellichamp, D.A.; *Process Dynamics and Control*, J. Wiley, New York, 1989
- Shiskey, F.G.; *Process Control Systems*, 2nd Ed, McGraw-Hill, New York, 1979
- www.emersonprocess.com/Rosemount
- www.samson.es

Canonades, vàlvulas i accesoris

- Pàgina web: www.isover.net/soluciones/industria/calorifugado_tuberias
- Pàgina web: www.isover.net
- C. Branan, *Rules of thumb for chemical engineers*, ELSEVIER, 4^a edició, 2005

Seguretat e Higiene

- Storch de Gracia, J.M., *Manual de seguridad industrial en plantas químicas y petroleras: Fundamentos, Evaluación de riesgos y Diseño*. Editorial McGrawHill.
- Fichas Internacionales de Seguridad Química

Medi ambient

- Decret 323/1994, de 4 de novembre, por el qual se regulen les instal·lacions de incineració de residus i els límits de les emissions a l'atmosfera.
- Decret 199/1995, de 16 de maig de aprovació dels mapes de vulnerabilitat i capacitat del territori referent a la contaminació atmosfèrica.
- Ley 5/1981, de 4 de Juny, de Evacuació i Tractament d'Aigües Residuals.
- Ley 6/1993, de 15 de juliol. Reguladora dels residus. De esta ley deriva tota la regulació sobre residus de Catalunya.

Avaluació econòmica

- Pàgina web: www.matche.com/ , pàgina basada en dades de la multinacional Gula costa per l'estimació del preu d'equips.
- www.icispricing.com/
- V. Vian, *El pronóstico económico en química industrial*, Ed. Eudema Universidad, Madrid (1991)
- J. Happel, D. J. Jordan, *Economía de los procesos químicos*, Ed. Reverte, Barcelona (1981)