



Escola Politècnica Superior
d'Enginyeria de Manresa

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA



VALORITZACIÓ DE DISSOLVENTS

TREBALL FINAL DE GRAU



8 DE JULIOL DEL 2015

ALUMNE: XAVIER SAEZ DE CORTAZAR GEA

PROFESSORA: ANNA BONSFILLS PEDRÓS

1. Índex

1. Introducció	6
2. Recuperació de dissolvents	7
2.1. Empreses que treballen en la recuperació a Catalunya	9
3. Objectius.....	12
4. La destil·lació	13
4.1. Equilibri líquid-vapor.....	13
4.1.1. Mescla binària ideal.....	13
4.1.2. Mescla multicomponent real	16
4.2. Destil·lació Flash	20
4.3. Intercanviadors de calor de carcassa i tubs.....	25
5. Mescla de dissolvents a estudiar	28
6. Problemàtica	32
7. Hysys.....	38
7.1. Introducció.....	38
7.2. Utilitat en aquest projecte.....	38
8. Proposta de procés industrial per separar la mescla de dissolvents.....	40
9. Càlculs.....	42
9.1. Destil·lació Flash	42
9.1.1. Composicions d'aliment	42
9.1.2. Temperatura d'aliment	51
9.1.3. Dimensionat del separador flash.....	54
9.2. Intercanviador de calor.....	54
9.2.1. Descripció de l'intercanviador.....	54
9.2.2. Dimensionat.....	54
9.3. Altres equips	66

9.3.1.	Tanc d'emmagatzematge	66
9.3.2.	Canonades	66
9.3.3.	Vàlvula reductora de pressió	69
10.	Resultats	71
11.	Conclusions.....	74
12.	Treball de futur	75
13.	Índex de figures	76
14.	Índex de taules	77
15.	Bibliografia.....	78
16.	Annex.....	79

Abstract

This project explains about solvents valuation, doing the appropriate calculation to carry through a flash distillation.

To carry out this calculation, we have to measure a flash separator. We have realized this calculation from calculate feed temperature. We have calculated the outgoing current, vapour current and liquid current, as well as we have calculated the outgoing compositions, the temperature and the pressure operation. In other hand, we have to measure a heat exchanger, to bring the feed from environment temperature to operation temperature.

In this sense, the project is characterized by be an open project, given that there are different ways to investigate. This ways of investigation will give us a good form to realize an economical solvent recovery.

Agraïments

Un cop finalitzat el treball final de grau vull agrair a totes les persones que han ajudat a fer-ho possible.

La llista d'agraïments hauria de ser molt llarga per que m'agradaria donar les gràcies a totes aquelles persones que m'han acompanyat no només en la realització d'aquest treball sinó també al llarg de la meva vida acadèmica. Des de les persones que van començar a tractar-me quan era ben petit al Col·legi Maristes de Sants, passant per l'Escola José Echegaray de Martorell amb professors de talla excepcional com l'Anna Ubide, també durant el meu pas per el Col·legi Mestral de Igualada agraint als professors que em van ajudar a formar-me com el José Fernández o el Felip Pera i per últim, durant el meu pas per el Col·legi La Mercè de Martorell. Aquí, vull fer un agraïment especial als meus tutors durant els tres cursos en que vaig ser alumne que van ser la Carme Puimedon, l'Elisabet Campos i la Montse Tió que en tot moment van ajudar-me en moments difícils. I també al Pedro Garcia que va fer que m'endollés en aquest món de la química.

També, vull agrair a la meva tutora del treball, l'Anna Bonsfills, que en tot moment ha estat al meu costat, ajudant-me, guiant-me i ha fet possible finalitzar el projecte.

I finalment, en l'àmbit personal, vull agrair amb molt d'èmfasi als meus amics i la meva família, però en especial a la meva parella, la Laura que sense ella no hagués estat possible, als meus germans i també als meus pares que han aconseguit que sigui la persona que sóc avui i que seré demà.

1. Introducció

El treball que es durà a terme, valorització de dissolvents, és un treball on s'intentarà realitzar una recuperació de dissolvents a partir d'un mètode econòmic. Es començarà explicant quin és l'actual estat dels dissolvents i quines empreses hi treballen a Catalunya en la recuperació. Posteriorment es farà una introducció a nivell teòric del que és la destil·lació flash. Es presentarà també, com serà la mescla de dissolvents a tractar, quines perillositats tindran els components d'aquesta mescla, quines seran les propietats físiques més representatives. Això, vindrà acompanyat de una normativa, que és el PSARI 2003, que és una normativa imposada per la ACA (l'Agència Catalana de les Aigües). Finalment, es mostrarà un diagrama de flux que serà el conjunt de la nostra planta per posteriorment, realitzar els càlculs de dimensionat, de composicions i tèrmics per posar en funcionament la planta.

2. Recuperació de dissolvents

Actualment, l'ús dels dissolvents a les indústries del nostre país és massiu. Són moltes activitats industrials les que requereixen de dissolvents per diferents objectius com podrien ser:

- Mitjans de reacció: creant un medi que afavoreixi el decurs de la reacció.
- Processos d'extracció i processos auxiliars de destil·lació.
- Preparació i aplicació de tints, vernissos, adhesius, pintures, etc.
- Neteja de superfícies, peces, equips.

Segons dades del Departament de Medi Ambient de la Generalitat de Catalunya, el consum de dissolvents és de 66.912 t/any entre els quals distingim 22.323 t/any usats en pintures, vernissos i tints.

Els dissolvents, com a compostos volàtils s'evaporen i passen a l'atmosfera. D'altra banda, tot i la poca solubilitat d'alguns dissolvents, és suficient per contaminar les aigües en cas de d'abocaments o vessaments. El fons de columnes de destil·lació o el filtratges de fluids són l'origen de residus sòlids.

La volatilitat en molts dissolvents ha estat aprofitada com un avantatge addicional en moltes de les seves aplicacions. Per aquest motiu, molts compostos orgànics han estat definits com a compostos orgànics volàtils (COV)¹.

Els dissolvents són uns productes potencialment problemàtics per al medi ambient. A l'Estat espanyol les emissions de dissolvents a l'atmosfera van ser de 377.000 tones l'any 1990 i 486.000 l'any 2001 segons dades de l'OCDE (Organització per la Cooperació i el Desenvolupament Econòmic). L'any 2013, segons dades del Ministeri d'Agricultura, Alimentació i Medi Ambient del Govern d'Espanya, hi va haver unes emissions de 44.267 tones.

N'hi ha que per aquest motiu mediambiental, s'han prohibit (1,1,1-tricloroetà). Per això, cal tenir molta cura en la seva gestió i minimitzar-ne els residus, especialment si es tracta de dissolvents halogenats.

¹ La directiva 1999/13/CE defineix els COVs com a tot compost orgànic que tingui a 293,15 K una pressió de vapor de 0,01 kPa o més, o que tingui una volatilitat equivalent en les condicions particulars d'ús.

A més, els dissolvent usats s'han de destinar, prioritàriament, d'acord amb la legislació vigent a Catalunya, a la regeneració per tal d'allargar-ne la vida útil.

Les emissions de dissolvents causen els següents impactes ambientals:

- Formació d'ozó troposfèric, que provoca escalfament global, es pot mesurar mitjançant l'índex POCP (Photochemical Ozone Creation Potential).
- Destrucció de la capa d'ozó estratosfèric, principalment per l'acció d'alguns halògens.
- Impacte sobre la salut, per la toxicitat.
- Impacte sobre la seguretat de persones i construccions degut a la inflamabilitat

Podem trobar els dissolvents pels tres medis: aigua, sòl i aire. Per aquest motiu, per no tenir una contaminació en massa, cal controlar tots els corrents residuals que contenen dissolvents i evitar, sobretot, que arribin a aigües superficials o sòls, ja que, actuarien com a agents d'impacte directe sobre els humans i el medi ambient.

Entre les propietats dels dissolvents que porten risc per a la seguretat es poden remarcar l'alta pressió de vapor i volatilitat, la inflamabilitat, l'explosivitat i la baixa conductivitat elèctrica.

L'ús de dissolvents orgànics en determinades activitats produeix emissions de compostos orgànics volàtils que poden ser perjudicials per a la salut de les persones i el medi ambient. Amb l'objectiu d'evitar o reduir els possibles efectes d'aquestes emissions, la Unió Europea i l'Estat espanyol han aprovat la Directiva 1999/13/CE i el Reial Decret 117/2003 que afecten determinades activitats que utilitzen dissolvents en quantitats importants.

A més, existeixen limitacions en la composició de determinats productes per tal de reduir les emissions de COV generades en el seu ús: Directiva 2004/42/CE, relativa a la limitació de les emissions de COV derivades de l'ús de dissolvents orgànics en determinades pintures, vernissos i productes de renovació de l'acabat de vehicles; i la seva transposició a l'Estat espanyol: Reial Decret 227/2006, de 24 de febrer, pel qual es complementa el règim jurídic sobre la limitació de les emissions de compostos orgànics volàtils de determinades pintures i vernissos i de productes de renovació de l'acabat de

vehicles.

A continuació s'exposen alguns exemples de dissolvents classificats segons la seva naturalesa:

- Hidrocarburs: Pentà, hexà, benzè, toluè.
- Hidrocarburs halogenats: Clorur de metilè, cloroform, 1,2-dicloroetà, tricoloroetilè, percloroetilè.
- Alcohols: Metanol, etanol, isopropanol.
- Èters: Diisopropil èter, tetrahidrofurà, 1,4-dioxà.
- Aldehids i cetones: Acetona, metil etil cetona, metil isobutil cetona, ciclohexanona.
- Èsters: acetat de metil, acetat d'etil, acetat d'n-butil.
- Compostos nitrogenats: N,N-dimetilformaamida, piridina, acetonitril

S'han provat moltes tècniques per poder recuperar dissolvents. La principal és la destil·lació, tècnica molt àmplia i amb molta diversitat per realitzar la recuperació en gairebé qualsevol tipus de mescla. Per altre banda, sol tenir problemes amb mescles azeotròpiques i per aquest mateix motiu, últimament s'està fent recalcament en una tècnica de membranes anomenada pervaporació. Aquesta, pot separar les mescles azeotròpiques. Normalment la pervaporació va acompanyada de la destil·lació per què en mescles no azeotròpiques la destil·lació té millor rendiment.

2.1. Empreses que treballen en la recuperació a Catalunya

Segons les dades de ARC (Agència de Residus de Catalunya) hi ha 6 empreses destinades a la regeneració de dissolvents.

- **Befesa Gestión de Residuos Industriales, SL.**

Aquesta empresa es dedica a la recuperació de dissolvents i a la transferència de residus perillosos, entre els quals, hi ha:

- Aigües químiques
- Halogenats
- No halogenats

- Àcids
- Bases
- Olis
- Altres

- **Bioibérica, S.A.**

És una empresa que es dedica a la fabricació de productes farmacèutics, heparina, etc. El seu procés productiu consta de varies etapes, entre les quals inclou la recepció de matèries primeres, les etapes d'extracció i les etapes de purificació. En aquestes fases s'utilitzen varies matèries i productes químics, com proteïnes, dissolvents orgànics, clorur sòdic, aigua, etc., els quals generen corrents residuals aquosos amb dissolvents.

Els corrents residuals que genera el procés tenen un notable impacte ambiental i, d'aquests, els que més impacte tenen són les aigües mares que es generen durant el procés de purificació del sulfat de condroitina. Aquest corrent residual es tracta internament mitjançant una columna de destil·lació que permet recuperar els dissolvents.

- **Distiller, S.A.**

És una empresa que ofereix una àmplia gama d'ofertes en el món del tractament de residus. Entre aquestes ofertes es troba la recuperació de dissolvents mitjançant tractaments de destil·lació/rectificació.

Utilitzen el següent diagrama de flux per a dur a terme la recuperació de dissolvents:

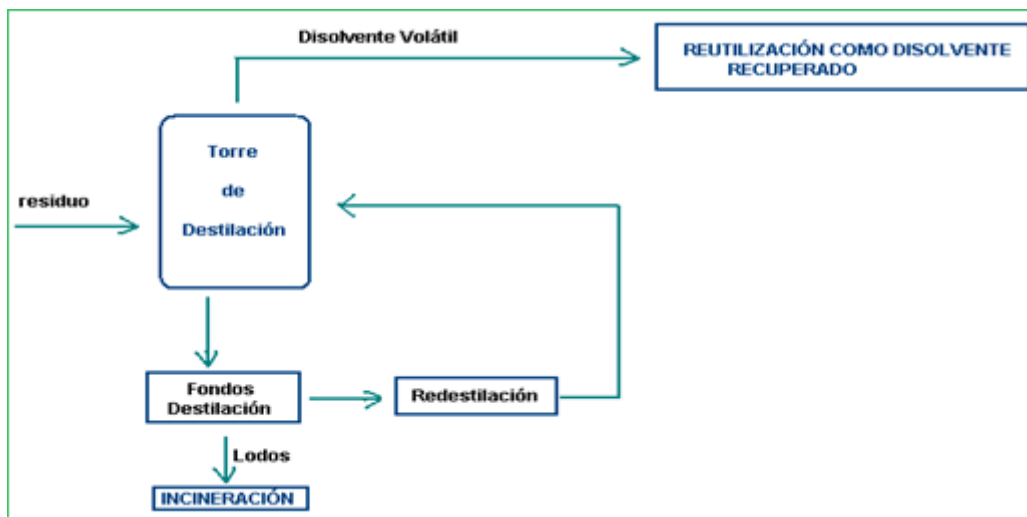


Figura 1: Diagrama de flux Distiller, S.A. Font: Distiller, S.A.

- **Ecología Química, S.A.**

Disposa d'una planta per la recuperació de dissolvents halogenats i no halogenats. Disposen de quatre columnes de destil·lació, un evaporador i una planta de desorció per al tractament i recuperació de dissolvents en llots de pintura.

- **Valls Química, S.A.**

S'encarrega de la gestió i reciclatge de dissolvents i altres efluent procedents principalment de l'automoció, els electrodomèstics, laques, esmalts i pintures, així com de l'indústria farmacèutica.

Alguns dels productes tractats a la planta són: alcohols, dissolvents clorats, acetones, acetats, hidrocarburs, glicols, amines i olis tèrmics entre d'altres. Valls Química és l'única planta a Europa que recicla l' àcid Pivàlic.

- **Aplicaciones Pulido Industrial, S.L.**

La web de l'agència catalana de residus la inclou com una empresa recuperadora de dissolvents, però no indica quin tipus de dissolvent recuperen. No tenen pàgina web de consulta.

3. Objectius

Aquest treball es basa en tres objectius principals:

- Estudiar la separació flash d'una mescla multicomponent per la posterior recuperació.
- Emprar una tecnologia econòmica en aquesta separació: la evapo-oxidació
- Calcular el disseny tèrmic i les dimensions d'una planta per dur a terme el procés.

4. La destil·lació

La destil·lació és una operació de separació a partir de la volatilitat dels components d'una mescla. Es basa en la propietat física del punt de ebullició ja que aquest no varia en funció de la massa o el volum. El procediment es basa en escalfar la mescla fins que el component més volàtil s'evapora i passa a través d'un condensador que el refreda i el liqua de nou.

Hi ha tres grans grups en els quals es separen les tècniques de destil·lació i són els següents:

- Destil·lació diferencial
- Destil·lació flash
- Destil·lació industrial o rectificació

4.1. Equilibri líquid-vapor

Per poder realitzar la separació dels components líquids mitjançant la destil·lació, és necessari saber les composicions dels compostos a destil·lar. Per aquest motiu hem de conèixer les relacions d'equilibri líquid-vapor.

4.1.1. Mescla binària ideal

Per començar a construir un equilibri líquid-vapor, podem partir de la Llei de Raoult que es defineix com: la relació entre la pressió de vapor d'un component de la mescla i de la fracció molar d'aquest component en la solució.

$$P_A = P_A^\circ \cdot x_A$$

On:

P_A → és la pressió parcial per al component A

P_A° → és la pressió de vapor per al component A

x_A → fracció molar en la fase líquida per al component A

El problema és que la Llei de Raoult només és exacte per a mescles ideals en equilibri. Quan es tracta d'una mescla binària, distingim els 2 components de la manera següent: el component A serà el més volàtil i el B serà el menys volàtil.

Mitjançant la Llei de Raoult i sabent la pressió del sistema podem arribar a obtenir una equació per trobar la fracció molar el component més volàtil (cmv).

$$P = P_A^\circ \cdot x_A + P_B^\circ \cdot x_B$$

On:

P → Pressió del sistema

$$P = P_A^\circ \cdot x_A + P_B^\circ \cdot (1 - x_A)$$

$$P = P_A^\circ \cdot x_A + P_B^\circ - P_B^\circ x_A$$

$$P = x_A(P_A^\circ - P_B^\circ) + P_B^\circ$$

$$x_A = \frac{P - P_B^\circ}{P_A^\circ - P_B^\circ} \quad [3.1.1]$$

Quan es tracta de gasos, utilitzem la Llei de Dalton que estableix que la pressió total que exerceix una barreja de gasos és igual a la suma de les pressions parcials que exerceixen individualment cadascun dels gasos que componen la mescla.

$$P_A = P \cdot y_A$$

On:

y_A → composició molar a la fase vapor

$$P \cdot y_A = P_A^\circ \cdot x_A$$

$$y_A = \frac{P_A^\circ \cdot x_A}{P} \quad [3.1.2]$$

En el diagrama d'equilibri es mostra la composició del component més volàtil en fase gas en vers la composició del component més volàtil en fase líquid.

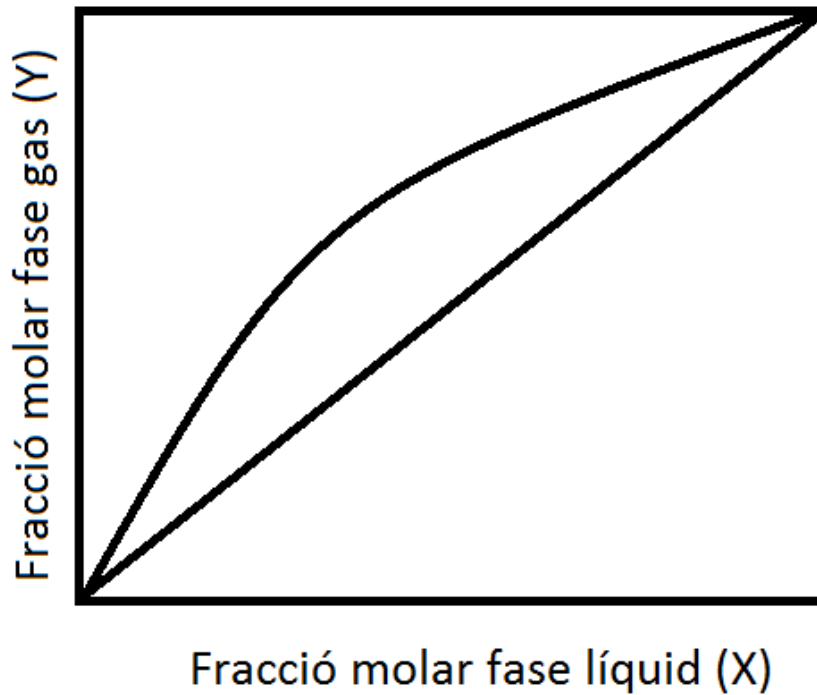


Figura 2: Diagrama d'equilibri en una mescla binària

Per saber la dificultat que ens portaria a dur a terme una destil·lació podem utilitzar el factor de la volatilitat relativa.

La volatilitat relativa s'utilitza en el disseny de tot tipus de processos de destil·lació, així com en altres processos de separació o absorció que impliquen la posada en contacte entre les fases vapor i líquid en les etapes d'equilibri.

La volatilitat relativa del component més volàtil es defineix com:

$$\alpha_A = \frac{P_A}{x_A}$$

On:

$\alpha_A \rightarrow$ volatilitat relativa per al component A

I la volatilitat relativa d'una mescla binària es defineix com:

$$\alpha_{AB} = \frac{\alpha_A}{\alpha_B}$$

Substituint:

$$\alpha_{AB} = \frac{\frac{P_A}{x_A}}{\frac{P_B}{x_B}}$$

$$\alpha_{AB} = \frac{P_A x_B}{P_B x_A}$$

Aplicant la llei de Dalton:

$$\alpha_{AB} = \frac{P y_A x_B}{P y_B x_A}$$

Finalment:

$$y = \frac{\alpha x}{1 + x(\alpha - 1)} \quad [3.2.1]$$

On $\alpha = \alpha_{AB}$ i y, x referint-se al component més volàtil.

4.1.2. Mescla multicomponent real

Per una mescla multicomponent real, les expressions de la llei de Raoult canvien i s'adapten al nombre de components existents en la mescla.

Per una banda, la llei de Raoult modificada ens proveeix d'una equació d'equilibri entre les fases de vapor i de líquid i ens apropa a la realitat. Per una mescla multicomponent, s'utilitzarà la següent:

$$\sum_{i=1}^c P_i^\circ x_i \gamma_i = P \cdot \sum_{i=1}^c y_i \quad [3.1.3]$$

On:

$\gamma \rightarrow$ és el coeficient d'activitat

4.1.2.1. Coeficient d'activitat

El coeficient d'activitat és un número que expressa el factor d'activitat químic en una substància en la seva concentració molar. El coeficient d'activitat serveix per comprovar quan una substància o mescla, difereix de la idealitat.

No es disposa de cap equació d'estat general per trobar el coeficient d'activitat en mescles líquides, per tant, la seva avaluació es basa en l'equació d'entalpia lliure d'excés per mol de mescla que és la següent:

$$G^E = \sum_{i=1}^c x_i RT \ln \gamma_i \quad [3.1.5]$$

On:

G^E → És l'entalpia lliure o energia de Gibbs, que és una funció d'estat que dona la condició d'equilibri i d'espontaneïtat per una reacció química.

R → És la constant dels gasos

T → Temperatura

Aquesta és una equació bàsica per el càlcul dels coeficients d'activitat dels distints components de mescles líquides reals, si es disposa d'expressions de l'entalpia lliure molar d'excés en funció de la temperatura, composició i pressió.

El comportament no ideal de les mescles líquides reals s'atribueix a diferència de formes, grandàries, estructures químiques i distribucions de les molècules dels seus components. El desconeixement de la veritable estructura dels líquids i de les forces intermoleculares fa difícil la predicció de les propietats de les mescles a partir de les corresponents als seus components purs.

Les desviacions del comportament ideal solen expressar-se mitjançant les funcions termodinàmiques d'excés, dependents de la composició, temperatura i pressió.

Scatchard va introduir el concepte d'entalpia lliure molar d'excés:

$$G^E = H^E - TS^E \quad [3.1.6]$$

On:

$H^E \rightarrow$ Entalpia

$S^E \rightarrow$ Entropia

Per poder representar la desviació de la idealitat de mescles reals ja que l'entalpia i entropies molars d'excés que la constitueixen són expressions de les causes del comportament real.

Descartada la hipòtesis d'una entalpia lliure molar d'excés nul·la ja que correspondria a mescla ideal, s'hauria de considerar en primer lloc mescles reals en les que algun component de l'equació [3.1.4] sigui nul.

Alguns autors (Margules, Van Laar, Scatchard, Hildebrand i Hamer)² van desenvolupar equacions de l'entalpia lliure molar d'excés suposant com a 0 la entropia molar d'excés S^E .

Altres autors (Flory i Huggins) van desenvolupar equacions per la entalpia molar d'excés suposant nul·la la entalpia molar d'excés H^E , és a dir, per a mescles semiideals o atèrmiques.

Per últim, es van desenvolupar equacions de la entalpia lliure molar d'excés per a mescles reals més apartades de la idealitat en les que tant H^E com S^E poguessin ser diferents de zero (Wilson, Renon i Prausnitz, Abrams i Prausnitz).

En el cas de les mescles reals:

a) Equació de Wilson

Un dels models investigats, va ésser l'equació de Wilson. Wilson considera que les mescles líquides són heterogènies, microscòpicament considerades. Segons ell, no han de coincidir les composicions locals de dos punts qualsevol d'aquestes, essent el concepte de composició local molt més valuós que el de composició mitjana en la formulació de possibles models físics de les mescles líquides.

El model de Wilson té una avantatge clara sobre la resta de models i és la seva aplicació, tot i que molt complicada, per a mescles multicomponents.

² Autors extrets de: **Novella, E. Costa.** *INGENIERÍA QUÍMICA 5. transferencia de materia. 1a parte.* Madrid : Alhambra. S.A., 1988.

Partint d'una mescla binària, Wilson intueix que les energies d'interacció g_{11} , g_{22} i g_{12} entre les molècules de la mateixa mescla determinaran les composicions locals. Centrant-se en una de les molècules del component 1, considera que la relació de probabilitats de trobar molècules 2 ó 1 al voltant d'aquesta serà de:

$$\frac{x_{12}}{x_{11}} = \frac{x_2 e^{-g_{12}/RT}}{x_1 e^{-g_{11}/RT}}$$

És a dir, que la relació entre el número de molècules 2 i el de molècules 1 al voltant d'una molècula 1, és la que existeix entre les fraccions molars corresponents corregides estadísticament per els factors de Boltzmann $e^{-g_{12}/RT}$ i $e^{-g_{11}/RT}$, proporcionals, respectivament, a les energies de interacció entre molècules 1 i 2, per una part, i 1 i 1, per altre.

Així doncs, establint que les mescles líquides estan constituïdes per molècules que difereixen en el seu volum efectiu i en les seves forces intermoleculares, determinants de les composicions locals, Wilson va donar la seva equació:

$$G^E = -RT \sum_{i=1}^c x_i \ln \sum_{j=1}^c x_j \Lambda_{ij}$$

Essent:

$\Lambda_{ij} \rightarrow$ Els paràmetres de Wilson

Al aplicar l'equació de Wilson a mescles multicomponents, tots els paràmetres de Wilson Λ_{ij} són estimables a partir de les dades experimentals sobre les corresponents mescles binàries.

Per altra banda, es poden trobar aquests paràmetres de Wilson mitjançant:

$$\Lambda_{ij} = \frac{v_j^l}{v_i^l} \cdot e^{-(g_{ij}-g_{ii})/RT}$$

On:

v_j^l i $v_i^l \rightarrow$ Els volums molars parcials dels components i i j de la mescla en la fase líquida

Per dur a terme el model de Wilson, així com els altres models citats anteriorment, es necessària una gran labor experimental, amb tots els components de la mescla i el seu comportament entre cadascun d'ells. Aquesta labor, és una labor molt complexa i no era l'objectiu principal en aquest treball. Si s'hagués donat el cas de tenir una mescla binària i no difícil de separar, s'hagués pogut provar d'intentar extreure aquest coeficient d'activitat mitjançant proves a diferents temperatures en una destil·lació al laboratori. Com que la mescla que es donarà, és una mescla triada en funció de diferents punts d'ebullició, de les normatives i del seu ús, aquesta mescla serà una mescla única en quant a composicions, per la qual cosa, es fa impossible amb els mitjans econòmics, de dimensionat i amb el temps que disposem de posar el Model de Wilson en pràctica per trobar aquests coeficients d'activitat per a cada component.

4.2. Destil·lació Flash

És un mètode que es porta en procés continu, l'alimentació s'introdueix al destil·lador, on es produeix la vaporització mitjançant aportació de calor o la disminució de la pressió.

La destil·lació flash es pot utilitzar tant en mescles binàries com en mescles multicomponents, tot i que, s'utilitza més en les últimes.

La destil·lació flash s'utilitza en moltes indústries ja que és una tècnica econòmica que només necessita d'una vàlvula adequada per realitzar la variació de la pressió sobtada.

En moltes destil·lacions flash es col·loca un intercanviador de calor previ per poder portar la mescla a una temperatura superior i així aconseguir un rendiment superior en la destil·lació.

En aquest treball ens centrarem en la destil·lació flash ja que és la tècnica necessària per poder dur a terme una futura **evapo-oxidació**.

L'evaporació oxidativa té el següent diagrama de flux:

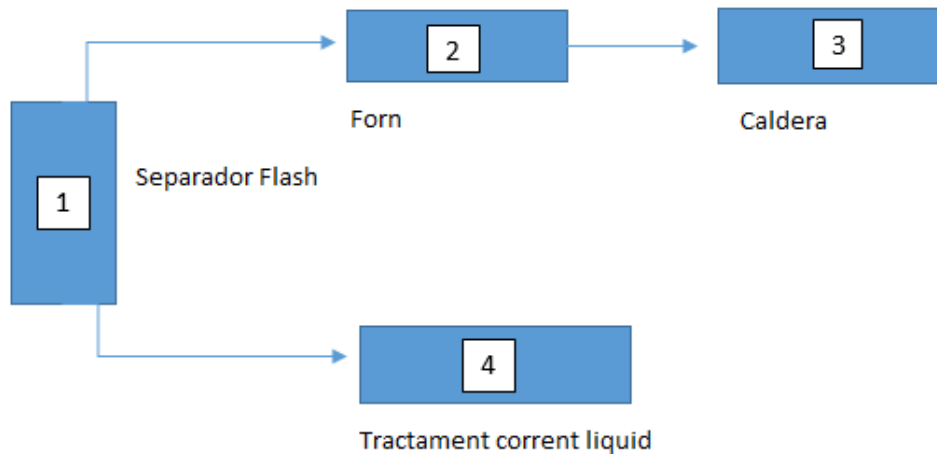


Figura 3: Diagrama de flux evapo-oxidació

On:

1 → La cambra on es produirà la separació flash, es crearan dos corrents, un de vapor i un de líquid. La fase vapor anirà a les fases 2 i 3. La fase líquida anirà a parar a la fase 4 del procés.

2 → És el forn on es produirà la oxidació tèrmica, amb l'aportació d'un corrent d'aire, s'oxidarà la fase vapor de l'aliment i es destruirà tota la fracció orgànica.

3 → A la fase número 3 es trobarà la caldera, a la qual, es recuperarà la calor i es podrà fer servir per generar vapor d'aigua per pre-escalfar l'aliment o altres usos.

4 → El corrent líquid anirà a parar a la fase número 4 on es produirà una recuperació energètica gràcies als components orgànics de la mescla, en el cas que sigui possible, es realitzarà una recuperació d'aquests dissolvents o una incineració d'aquests.

- Càlculs flash

Per realitzar el càlcul en una mescla amb diversos components, es disposa d'una equació d'equilibri que relaciona la fase vapor i la fase líquida:

$$y_i = K_i x_i \quad [3.1.4]$$

On aquesta K, és la relació d'equilibri que s'obté de relacionar la pressió de vapor del component pur amb la pressió de l'operació:

$$K_i = \frac{P_i^o}{P} \quad [3.1.5]$$

a) Balanç de matèria

La condició indispensable per a què es produeixi la destil·lació flash és que la temperatura d'equilibri T estigui entre la temperatura de rosada i la temperatura de bombolla que correspondrien a barreges de la mateixa composició que la original a pressió P a la que es desenvolupa la destil·lació.

A la *figura 4* s'esquemmatitza aquesta destil·lació d'equilibri. A la pressió P i temperatura T , F mols de mescla d'aliment de composició x_{0i} es separen en L mols de líquid de composició x_i i V mols de vapor de composició y_i . Plantejant balanços de matèria tota i del component i , s'obtindrà:

$$F = L + V \quad [3.3.3]$$

$$Fx_{0i} = Lx_i + Vy_i \quad [3.3.4]$$

Complint-se a més la condició d'equilibri:

$$y_i = K_i x_i \quad [3.3.5]$$

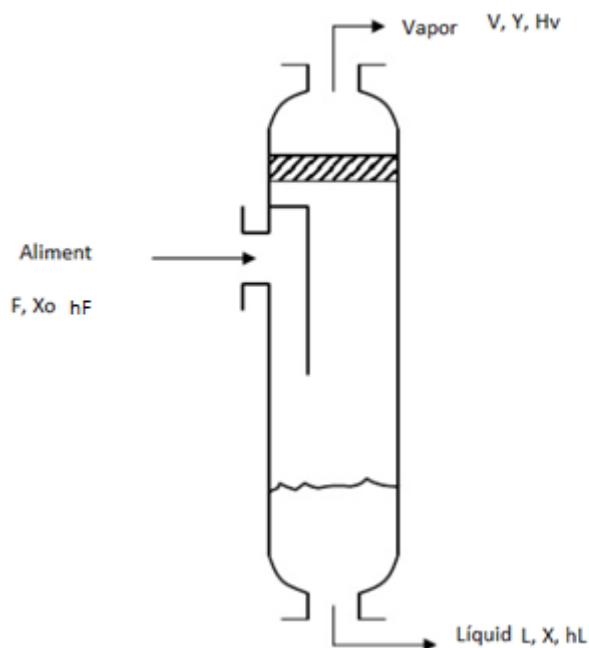


Figura 4: Esquema destil·lació flash. Font: Google imatges

De les equacions [3.3.3] i [3.3.5] es dedueix:

$$F x_{0i} = L \frac{y_i}{K_i} + (F - L)y_i$$

$$y_i = \frac{x_{0i}}{1 - q[1 - 1/K_i]} \quad [3.3.6]$$

Havent representat per q , d'acord amb l'equació [3.3.1], la relació L/F.

Sumant totes les equacions [3.3.6] corresponents als diferents components s'obtindrà:

$$1 = \sum_{i=1}^c \frac{x_{0i}}{1 - q[1 - 1/K_i]} - 1 \quad [3.3.7]$$

Mitjançant els mètodes de tempteig iteratius es podrà saber el valor de la fracció q que resolgui l'equació [3.3.7]. Per això, cal convenir la seva funció:

$$g(q) = \sum_{i=1}^c \frac{x_{0i}}{1 - q[1 - 1/K_i]} - 1 = 0 \quad [3.3.8]$$

Que haurà d'anular-se per el valor correcte de $q > 0$.

La equació [3.3.8] de grau c té c arrels de les que només dos tenen significat físic: $q = 0$, que correspon a la vaporització total de la mescla original i $0 < q < 1$, que és el valor buscat corresponent a la destil·lació d'equilibri.

Un cop trobat el valor de q a l'equació [3.3.6] aplicada a tots els components de la mescla permet calcular les seves fraccions molars y_i en la fase vapor, la seva quantitat serà evidentment $F(1-q)$.

A partir dels valors y_i , les equacions [3.3.5] de tots els components conduiran a les seves fraccions molars x_i en la fase líquida residual, la seva quantitat serà Fq .

b) Balança d'energia

El balanç d'energia d'una destil·lació flash ve determinat per la següent equació:

$$Q + Fh_F = Lh_L + VH_V \quad [3.3.9]$$

On el paràmetre Q representarà l'energia extra que es pugui afegir al sistema per no haver de tenir una alta temperatura d'aliment per exemple.

Les entalpies molars de la mescla líquida original i de les dues fases que s'originen en la destil·lació flash poden expressar-se de la següent manera:

- Alimentació:

$$h_F = \sum_{i=1}^c x_{0i} (\overline{C}_{L_i} \cdot (T_F - T_{ref})) \quad [3.3.10]$$

On:

\overline{C}_{L_i} → És la calor específica mitjana per el líquid de composició *i*

- Líquid:

$$h_L = \sum_{i=1}^c x_i (\overline{C}_{L_i} \cdot (T - T_{ref})) \quad [3.3.11]$$

- Vapor:

$$H_V = \sum_{i=1}^c y_i (\overline{C}_{L_i} \cdot (T_{ebi} - T_{ref}) + \lambda_{i,Tebi} + \overline{C}_{V_i} (T - T_{ebi})) \quad [3.3.12]$$

On:

$\lambda_{i,Tebi}$ → És la calor latent de vaporització

\overline{C}_{V_i} → Calor específica mitjana en estat vapor pel component *A*

En primer lloc s'han de calcular les quantitats i les composicions com s'ha indicat en el apartat a).

Amb el calculat anteriorment, i el balanç d'energia, es troba una equació definitiva per a trobar la temperatura de l'aliment necessària a la separació flash.

$$h_F = qh_L + (1 - q)H_V$$

[3.3.13]

4.3. Intercanviadors de calor de carcassa i tubs

Un intercanviador de calor de carcassa i tubs és un equip dissenyat per transferir calor entre dos o més fluids. En aquest treball, estarà destinat a augmentar la temperatura de l'aliment que es trobarà a 25°C fins a la temperatura que es calcularà posteriorment.

La característica principal dels intercanviadors de carcassa-tubs es que estan formats per un conjunt de tubs situats a dintre d'una carcassa, per on circulen dos diferents corrents que es poden trobar en estat líquid o gasós i en el qual la transferència de calor es produeix a través del conjunt dels tubs.



Figura 5: Intercanviador carcassa i tubs. Font: Google imatges

Aquest tipus d'intercanviadors estan estandarditzats per "The Tubular Exchanger Manufacturers Association". El TEMA és l'associació comercial de fabricants líders que han estat pioners en la investigació i en el desenvolupament del disseny d'intercanviadors de calor de carcassa-tubs. És a dir, és una normativa de disseny on es recull totes les característiques que ha de tenir un intercanviador de calor de carcassa tubs.

Abans de calcular qualsevol disseny és necessari conèixer les condicions en les qual treballarà l'equip.

Primerament, es comença per el disseny tèrmic que és la part que correspon a analitzar tota la transferència de calor que s'efectua entre els dos fluids. Mitjançant aquests càlculs es pot dimensionar l'intercanviador de calor per tal que estigui dins de les condicions de treball.

L'intercanviador de calor de carcassa i tubs que s'utilitzarà en aquest treball serà un equip a contracorrent.

Per tal de dissenyat l'intercanviador de calor es seguiran uns passos:

1. Decidir quin tipus d'intercanviador es vol.
2. Obtenir totes les dades físiques dels fluids (densitat, viscositat, capacitat calorífica, conductivitat tèrmica, etc).
3. Calcular els balanços de calor per als dos fluids i l'equació general.

$$q = W_1 C p_1 \Delta T_1 \quad [4.1]$$

On:

W_1 → Cabal màssic del fluid 1.

W_2 → Cabal màssic del fluid 2.

Cp_1 i Cp_2 → Capacitats calorífiques dels fluids 1 i 2.

$$q = W_2 C p_2 \Delta T_2 \quad [4.2]$$

$$q = U A \Delta t_{log} \quad [4.3]$$

4. Calcular el coeficient global de transferència de calor.

$$U_o = \frac{1}{\frac{D_o}{D_i h_i} + \frac{D_o}{2K} \ln \frac{D_o}{D_i} + \frac{1}{h_o}} \quad [4.4]$$

5. Calcular la diferència de temperatura logarítmica.

$$\Delta t_{log} = \frac{(T_1 - T'_2) - (T_2 - T'_1)}{\ln\left(\frac{T_1 - T'_2}{T_2 - T'_1}\right)} \quad [4.5]$$

6. Calcular l'àrea de transferència requerida

$$A_o = \frac{q}{U_o \cdot \Delta t_{log}} \quad [4.6]$$

7. Determinar el nombre de tubs i la seva llargada.

$$A_o = A_{o,tub} \cdot N_{tubs} \quad [4.7]$$

$$A_o = \pi D_{o,tub} \cdot L_{tub} \cdot N_{tubs} \quad [4.8]$$

5. Mescla de dissolvents a estudiar

La mescla que s'utilitzarà per introduir-la com a aliment en el procés ha estat escollida en funció dels dissolvents que s'usen en les indústries. És una mescla que està composta per 7 components de diferents punts d'ebullició, aquests punts d'ebullició van des de 64.65 °C fins a 197.25 °C. L'alta variació de punts d'ebullició farà que s'hagin de forçar les condicions de la separació flash per veure fins a quin punt de separació es pot arribar.

La mescla estarà composta per 6 compostos que estaran dins de grups de compostos orgànics i per aigua.

A continuació es col·loca una taula on estan els components utilitzats i al grup que pertanyen:

Tabla 1: Components triats i els seus grups

Component	Grup
Aigua	-
Benzè	Hidrocarbur aromàtic
Toluè	Hidrocarbur aromàtic
Ciclohexà	Hidrocarbur
Metanol	Alcohol
Fenol	Alcohol
Etilenglicol	Alcohol

Aquests components tenen una perillositat en vers les persones i en vers el medi ambient diferents, i aquesta perillositat, està explicada a les fitxes de seguretat de les que es mostra la informació més rellevant a continuació:

- **Benzè:**

És una substància altament inflamable i tòxica. Té perill d'explosió i risc d'incendiar-se, per això es recomana no fumar al voltant, no crear espurnes i evitar les flames.

És una substància altament tòxica per la fauna aquàtica i per aquest motiu és molt important no realitzar abocaments de mescles que continguin aquesta substància.

- **Toluè**

És una substància altament inflamable i nociva. És una substància perillosa per les persones ja que inhalar el toluè pot provocar nàusees, vòmits, pèrdues de coneixement, etc. Es recomana evitar fumar al voltant, no crear espurnes i evitar les flames.

És una substància altament tòxica per la fauna aquàtica i per aquest motiu és molt important no realitzar abocaments de mescles que continguin aquesta substància.

- **Ciclohexà**

Està caracteritzat per ser un component altament perillós pel medi ambient, a més de nociu i inflamable. Es recomana evitar fumar al voltant, no crear espurnes i evitar les flames.

És una substància altament tòxica per la fauna aquàtica i per aquest motiu és molt important no realitzar abocaments de mescles que continguin aquesta substància.

- **Metanol**

Es tracta d'una substància tòxica i inflamable. Es recomana evitar fumar al voltant, no crear espurnes i evitar les flames.

- **Fenol**

És una substància tòxica i corrosiva. És una substància combustible.

És una substància altament tòxica per la fauna aquàtica i per aquest motiu és molt important no realitzar abocaments de mescles que continguin aquesta substància.

- **Etilenglicol**

És una substància nociva i combustible. És important evitar les flames per tal de no provocar un incendi.

Pot provocar danys en aparells humans produint tos, mal de cap, vertigen, dolor abdominal, etc.

Els sis components a tractar són problemàtics per a la salut i com a tal, tenen uns valors límits llindars (TLV).

Dins d'aquests trobem alguns com:

- TLV-TWA: TWA és la concentració mitjana ponderada en el temps, per una jornada de 8 hores i 40 hores setmanals, a la qual, la majoria dels treballadors poden estar exposats repetidament dia rere dia sense patir efectes adversos.
- TLV-STEL: STEL és la concentració a la que poden estar exposats els treballadors durant un curt espai de temps sense patir irritació, dany crònic o irreversible en els teixits o narcosis important. No és un límit d'exposició separat i independent, sinó un complement de la mitjana ponderada en el temps (TWA). Es defineix com la expressió mitjana ponderada en el temps durant 15 minuts que no ha de ser sobrepassada en cap moment de la jornada.
- VLA-ED: És el valor de referència per la Exposició Diària (ED), que és la concentració mitjana de l'agent químic en la zona de respiració del treballador mesurada, o calculada de forma ponderada respecte el temps, per la jornada laboral real i referida a una jornada estàndard de 8 hores diàries. D'aquesta manera els VLA-ED representen condicions a les quals es creu, basant-se en els coneixements actuals, que la majoria dels treballadors poden estar exposats 8 hores diàries i 40 hores setmanals durant tota la seva vida laboral, sense patir efectes adversos per a la salut.

A continuació una taula amb els diferents valors:

Tabla 2: TWA, STEL y VLA

Compost	TWA (ppm)	STEL (ppm)	VLA (ppm)
Benzè	0,5	2,5	1
Toluè	50	100	50
Ciclohexà	100	375	200
Metanol	200	250	200
Etilenglicol	10	50	20
Fenol	5	5	2

A base de diferents càlculs adjuntats a l'Annex, es va determinar la següent composició per a l'aliment:

Tabla 3: Composició de l'aliment en fracció kilomolar

Compost	xf
Aigua	0,4952
Benzè	0,1996
Toluè	0,0071
Ciclohexà	0,151
Metanol	0,1413
Etilenglicol	0,0042
Fenol	0,0016

Aquests components tenen propietats físiques diferents. A continuació es pot veure una taula on hi ha les principals dades físiques dels diferents components i dos temperatures (la temperatura a la que està emmagatzemat l'aliment i la temperatura d'operació de la separació flash).

Tabla 4: Dades físiques de l'aliment

Compost	teb (°C)	Densitat (90 °C) (mol/dm ³)	Densitat (25°C) (mol/dm ³)	P ^o (90°C) (kPa)	P ^o (25 °C) (kPa)
Aigua	100	53,46	55,22	69,7262	3,1411
Benzè	81	10,30	11,18	140,943	12,243
Toluè	110	8,70	9,38	53,9485	3,7638
Ciclohexà	80,1	8,45	9,19	132,402	12,951
Metanol	64,65	22,53	24,65	254,346	16,837
Etilenglicol	197,25	17,12	17,89	1,27756	0,01682
Fenol	181,85	10,78	11,39	3,41355	0,05525

On la P^o és la pressió de vapor en kPa.

6. Problemàtica

A Catalunya, els abocaments residuals industrials estan regulats pel Programa de Sanejament d'Aigües Residuals Industrials (PSARI) i té com a objectiu principal assolir els objectius de qualitat establerts al Programa.

El PSARI que hi ha en vigor actualment és el del 2003 i s'emmarca inicialment entre la Directiva 91/271CEE, sobre sanejament d'aigües residuals urbanes, la Directiva 76/464CEE i les directives «filles» relatives a l'abocament de substàncies perilloses, per arribar en un futur a l'assumpció plena de la Directiva marc.

Els objectius d'aquest programa són els següents:

- Identifica les prioritats i les tendències en l'àmbit de la contaminació dels abocament industrials.
- Estableix un nou model de relació entre administracions i establiments industrials en l'àmbit dels abocaments.
- Redueix les substàncies específiques i prioritàries d'acord amb els objectius de qualitat

El PSARI recull una taula amb diferents paràmetres fisicoquímics mesurables per saber si el nivell de qualitat de les aigües és bo o no.

Tabla 5: Contaminants específics. Font: PSARI 2003

Contaminants específics	Valor límit (µg/l)
Substàncies prioritàries i substàncies perilloses prioritàries (*) recollides en l'annex x de la Directiva 2000/60/CE (Decisió 2455/2001)	
Alaclor	0,002
Antracè (*)	0,01
Atrazina (*)	1
Benzè	5
Cadmi	2
Cloroform	1
1,2-dicloroetà	5
Diclorometà	10
Diuron (*)	50
Endosulfan (*)	0,001
Hexaclorobenzè (*)	0,02
Hexaclorobutadiè (*)	0,1
Hexaclorociclohexà (*)	0,02
Hidrocarburs policíclics aromàtics (HAP) (*)	0,05
Mercuri (*)	0,8
Naftalè (*)	5
Níquel	20
Nonilfenol (*)	0,1
Octilfenols (*)	0,1
Pentaclorobenzè (*)	0,02
Pentaclorofenol (*)	0,1
Plom (*)	20
Simazina (*)	1
Triclorobenzè (*)	0,4
Tributilestany (*)	0,02
Trifluralina (*)	0,1

Tabla 6: Contaminants específics 2. Font: PSARI 2003

Substàncies contaminants RD 995/2000, annex I (modif. RD 849/1986)	
Arsènic total	50
Cianurs totals	20
Clorobenzè	2
Coure dissolt	40
Crom total dissolt	20
Diclorobenzè	2
Etilbenzè	5
Fluorurs	1.700
Metolaclor	1
Seleni dissolt	1
Terbutilazina	1
Toluè	5
Tricloroetà	50
Xilè	5
Zinc total	300

A la taula on es mostra el nivell límit d'alguns compostos es pot comprovar que apareixen compostos que estan inclosos en la nostra mescla aliment com són el benzè o el toluè, tots dos superen el límit que marca la normativa del PSARI 2003. El valor límit per el benzè és de 5 µg/l.

En el cas del nostre aliment:

- Abans de realitzar el càlcul de la concentració d'una substància, s'ha de conèixer la densitat de la substància i la massa molar.

- Densitat:

Per realitzar el càlcul de la densitat del fluid, s'obtidran les dades del *Perry's Chemical Engineers' Handbook* de la següent manera:

S'obtenen unes constants per a cada compost:

Tabla 7: Constants per al càlcul de la densitat

	C1	C2	C3	C4
Aigua	-13,851	0,64038	-0,00191	1,82E-06
Benzè	1,0259	0,2666666	562,05	0,28394
Toluè	0,8792	0,27136	591,75	0,29241
Ciclohexà	0,88998	0,27376	553,8	0,28571
Metanol	2,3267	0,27073	512,5	0,24713
Etilenglicol	1,315	0,25125	720	0,21868
Fenol	1,3798	0,31598	694,25	0,32768

L'equació descrita pel Handbook per l'aigua entre 273.16 i 647.096 K és la següent:

$$\rho = 17.863 + 58.606\tau^{0.35} - 95.396\tau^{\frac{2}{3}} + 213.89\tau - 141.26\tau^{4/3}$$

On:

$$\tau = 1 - \frac{T}{647.096}$$

On:

$\tau \rightarrow$ és una variable aplicada pel Handbook per poder calcular la densitat de l'aigua

l'equació descrita per la resta de compostos és la següent:

$$\rho = \frac{C1}{C2^{[1+(1-\frac{T}{C3})^{C4}]}}$$

Amb això, i realitzant les ponderacions tal i com és l'aliment, s'obtindrà a 298 K, que serà la temperatura de l'aliment una densitat de:

$$\rho = 861,79 \text{ g/dm}^3$$

- Massa molar

Tabla 8: Càlcul de la massa molar

xf (fracció molar)	Massa Molar	xf·MM
0,4952	18	8,914
0,1996	78,11	15,591
0,0071	92,14	0,654
0,151	84,16	12,708
0,1413	32,04	4,527
0,0042	62,07	0,261
0,0016	94,11	0,151
	SUMA	42,805

Un cop realitzats els càlculs previs, ja es pot conèixer la concentració de benzè i toluè.

$$0.1996 \frac{\text{kmols benzè}}{\text{kmol de mescla}} \cdot \frac{78 \text{ kg benzè}}{1 \text{ kmol benzè}} \cdot \frac{1 \text{ kmol mescla}}{42,805 \text{ kg mescla}} \cdot \frac{861,79 \text{ kg mescla}}{1 \text{ m}^3 \text{ mescla}}$$

$$= \mathbf{313,44 \text{ kg/m}^3}$$

Com es pot comprovar, es supera la normativa amb escreix.

En el cas del toluè, comprovem que el seu límit també és de 5 µg/l.

En el cas del nostre aliment:

$$0.0071 \frac{\text{kmols toluè}}{\text{kmol de mescla}} \cdot \frac{92 \text{ kg toluè}}{1 \text{ kmol toluè}} \cdot \frac{1 \text{ kmol mescla}}{42,805 \text{ kg mescla}} \cdot \frac{861,79 \text{ kg mescla}}{1 \text{ m}^3 \text{ mescla}}$$

$$= \mathbf{13,15 \text{ kg/m}^3}$$

També supera la normativa PSARI 2003 amb escreix.

Aquesta mescla és molt evident que no pot ser abocada sense ser tractada.

Tabla 9: Contaminants específics 3. Font: Normativa PSARI 2003

Substàncies contaminants de la Directiva 76/464/CE i altres fonts	
AOX	40
Percloroetilè	1
PCB	0,005
Tricloroetilè	1
Tetraclorur de carboni	1

Tabla 10: Nivell qualitat aigua. Font: Normativa PSARI 2003

Paràmetre	Unitats	Nivell de l'estat de les aigües				
		Molt bo 1	Bo 2	Moderat 3	Deficient 4	Dolent 5
pH	unit. pH	No s'observen variacions significatives respecte dels valors naturals 6,5 ÷ 9,5 com a interval de referència general				
Temperatura	°C	No s'observen variacions significatives respecte al règim de temperatures natural. Temperatura màxima de referència general 25 °C				
Oxigen dissolt	% saturació	>90	70	50	25	<25
. Trams alts		>80	60	40	20	<20
. Trams baixos						
Oxidabilitat (al permanganat)	mg/l	3	7	10	20	>20
DBO	mg/l	3	5	7	15	>15
TOC	mg/l	3	5	7	12	>12
Clorurs	mg/l	salí de manera natural				
. Zones de salinitat natural baixa		50	100	200	400	>400
. Zones de salinitat natural moderada		100	250	400	600	>600
. Zones de salinitat natural elevada		300	600	1000	2000	>2.000
. Zones de transició o de forta intrusió salina						
Sulfats	mg/l	50	100	200	400	>400
. Zones de contingut natural baix		100	200	400	600	>600
. Zones de contingut natural moderat		200	400	600	800	>800
. Zones de contingut natural elevat						
Amoni	mg/l	0,2	0,5	1	5	>5
Nitrats	mg/l	5	25	50	100	>100
Fosfats	mg/l	0,1	0,5	1	2	>2

Per avaluar quin és el nivell de qualitat atribuïble a un punt de control concret s'han d'establir els criteris sobre els quals es farà la diagnosi.

- pH: Si un valor supera l'interval establert (6,5-9,5) es realitzarà un anàlisi per tal de comprovar si es degut o no per causes naturals. En cas que no ho sigui, significaria que aquest aigua no està en bon estat. A més, en cas que no se sobrepassi l'interval però hi hagi una tendència significativa cap a la modificació de valors com a conseqüència de la mà humana que facin variar el valor mitjà en més de 0.5 unitats respecte a l'anterior període, no s'assolirà el bon estat.
- Temperatura: Qualsevol aigua que contingui un valor superior a 25 °C s'estudiarà, de manera que si es degut a causes no naturals es considerarà que

no assoleix el bon estat. A més, en cas que no se sobrepassi l'interval però hi hagi una tendència significativa cap a la modificació de valors com a conseqüència de la mà humana que facin variar el valor mitjà en més de 2 °C respecte a habitual, no s'assolirà el bon estat.

- Oxigen dissolt, oxidabilitat, DBO, TOC, clorurs, sulfats, amoni, nitrats i fosfats: Seran necessaris com a mínim sis resultats analítics i el valor mitjà del període serà el que atribuirà el nivell corresponent de qualitat en cadascun dels paràmetres esmentats.
- Contaminants específics: en el període avaluat no s'haurà d'enregistrar cap valor superior al límit establert com a condició per obtenir com a mínim el bon estat. En el cas dels AOX, compostos orgànics halogenats, es poden detectar puntualment valors superiors als 40 µg/l, sempre que no se superi el 50% de cap límit de compostos organoclorats individualitzats.

7. Hysys

7.1. Introducció

Hysys és una eina de simulació de processos creada per la companyia AspenTech que serveix per el disseny, càlcul i optimització d'una indústria d'enginyeria química.

Aquest software permet simulacions tant en estat estacionari com en estat dinàmic. Les seves operacions i propietats permeten modelar una àmplia gama de processos, té una gran base termodinàmica i els seus paquets de propietats porten a la presentació de models realistes.

Entre la gran varietat d'utilitats que posseeix Hysys, cal destacar les següents:

- Utilitzar models termodinàmics, components i les seves propietats, mescles i propietats d'aquestes.
- Simular operacions unitàries: destil·lacions, evaporacions, extraccions líquid-líquid, adsorcions, absorcions, etc.
- Simular processos amb corrents de recirculació.
- Simular reactors: de conversió, mescla completa, flux pistó, etc.
- Establir balanços de matèria i d'energia.
- Simular qualsevol tipus d'operació encarada a la indústria petroquímica.

7.2. Utilitat en aquest projecte

El programa informàtic Hysys m'ha permès dur a terme simulacions prèvies per comprovar que el projecte que volia portar a terme era perfectament viable.

El Hysys és un programa que treballa amb moltes dades termodinàmiques però mai et mostra d'on surten els càlculs que fa i això va ser un problema ja que és com una caixa negra que no et mostra les equacions que fa servir o algunes dades que són importants com el coeficient d'activitat usat per a cada component.

Per altra banda, va ser molt útil per a situar-nos en un marge de pressions. El Hysys no té cap problema a l'hora de treballar amb qualsevol dada, simula el que el programador introdueix i això va ser perfecte per comprovar en quin marge de pressions es podia moure el nostre separador flash.

Al situar-nos en aquest marge de pressions, el Hysys va permetre guiar-nos per a tenir una lleugera idea de quines composicions tindria el nostre problema.

8. Proposta de procés industrial per separar la mescla de dissolvents

El problema plantejat consta d'un grup de dissolvents que s'han de tractar en funció a la normativa pertinent. Aquests dissolvents, a partir d'ara, aliment, són residus procedents de diferents indústries, els quals, òbviament no es poden abocar al clavegueram.

El procediment constarà dels següents equips:

- Tanc d'inici o d'emmagatzemament.
- Intercanviador de calor de carcassa i tubs.
- Vàlvula reductora de pressió.
- Separador Flash.

El procediment tindrà inici en el tanc d'emmagatzematge on hi haurà acumulat aliment a 25 °C per fer funcionar la planta durant 1 dia sencer de tal manera que el tanc d'emmagatzematge estigui sempre ple. Aquest tanc serà de forma cilíndrica i estarà connectat amb una canonada de dos polsades de diàmetre que portarà l'aliment fred a un intercanviador de calor de carcassa i tubs que farà pujar la temperatura de la mescla fins a la temperatura desitjada. La temperatura desitjada serà calculada en el següent apartat juntament amb les composicions de la mescla i condicions d'operació.

Posteriorment, aquest aliment pre-escalfat passarà per una vàlvula reductora de pressió per reduir la pressió que portarà del corresponent escalfament fins a la pressió necessària per a la separació flash.

Un cop passada aquesta vàlvula, s'entrarà a l'operació flash on es produirà la separació obtenint així dos corrents: un corrent de vapor i un corrent líquid.

El problema presentarà el següent diagrama de flux:

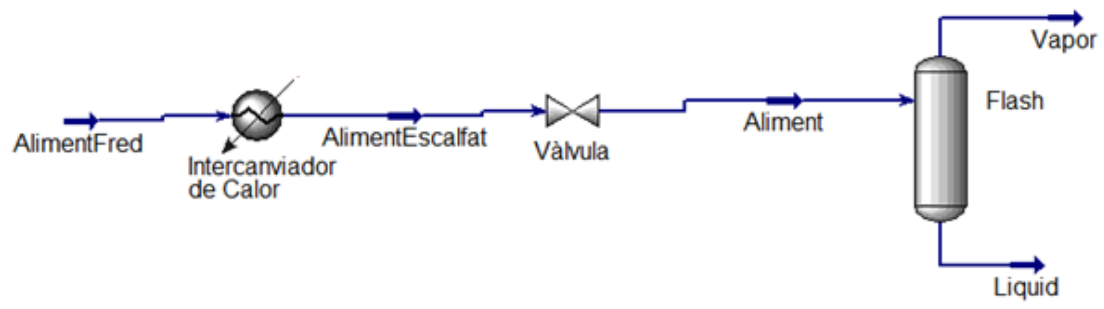


Figura 6: Diagrama de flux. Font: Hysys

9. Càlculs

9.1. Destil·lació Flash

9.1.1. Composicions d'aliment

Per poder realitzar els càlculs definitius, s'han utilitzat diversos models de càlcul fins que finalment degut al tipus de resultats obtinguts, s'ha triat per un dels models i per unes condicions d'operació.

L'elecció d'aquests resultats es deguda a haver separat el màxim possible la mescla i haver deixat 2 dels compostos amb una fracció gairebé nul·la en la fase vapor.

El model utilitzat per realitzar aquests càlculs està extret del llibre *"Ingenieria Química 5: transferencia de materia. 1a parte"*.

Per la realització d'aquest model, s'ha de partir de l'equació de Raoult modificada. Aquesta equació dependrà de les pressions de vapor de cada component. Per calcular aquestes pressions de vapor s'ha d'utilitzar l'Equació d'Antoine.

$$\ln P^0 = A + \frac{B}{T + C} + D \ln(T) + ET^F$$

On la pressió ve donada en *kPa* i la temperatura en *K*.

Gràcies a l'eina informàtica Aspen Hysys, es poden trobar aquests valors A, B, C, D, E i F que són constants que conté la llibreria del programa.

Tabla 11: Constants de l'Equació d'Antoine

Compost	A	B	C	D	E	F
Aigua	65,9278	-7227,53	0	-7,17695	4,03E-06	2
Benzè	1,70E+02	-1,03E+04	0	-2,36E+01	2,09E-05	2,00E+00
Toluè	7,65E+01	-7,00E+03	0	-9,1635	6,23E-06	2,00E+00
Ciclohexà	7,10E+01	-6,19E+03	0	-8,46523	6,45E-06	2,00E+00
Metanol	5,98E+01	-6,28E+03	0	-6,37873	4,62E-06	2,00E+00
Etilenglicol	5,79E+01	-8,86E+03	0	-5,7166	3,11E-06	2,00E+00
Fenol	1,29E+02	-1,17E+04	0	-1,64E+01	7,85E-06	2,00E+00

La temperatura de la separació serà de 90 °C, per tant, 363 K. Amb això i aplicant l'Equació d'Antoine, es poden trobar les pressions de vapor per a cada component:

Tabla 12: Pressions de vapor calculats a 363 K

Compostos	P° (kPa)
Aigua	69,7262
Benzè	140,943
Toluè	53,9485
Ciclohexà	132,402
Metanol	254,346
Etilenglicol	1,27756
Fenol	3,41355

Un cop es disposa de les pressions de vapor, es pot aplicar el model matemàtic triat.

Primerament, es calculen les constants K_i que provenen de la relació entre la pressió de vapor de cada component i la pressió d'operació.

Posteriorment, s'aplicarà l'equació amb la que s'obtindrà el valor q .

$$g(q) = \sum_{i=1}^c \frac{x_{0i}}{1 - q[1 - \frac{1}{K_i}]} - 1 = 0$$

Aquest valor de q serà el valor del cabal molar de líquid per a base de càlcul 1 mol.

Haurem de substituir el valor de q i les composicions d'aliment i obtindrem les composicions de vapor:

$$y_i = \frac{x_{0i}}{1 - q[1 - 1/K_i]}$$

I per últim, substituïrem les composicions de vapor en la següent equació per trobar les composicions al líquid:

$$y_i = K_i x_i$$

Per poder aplicar aquestes equacions als nostres 7 components de la mescla, es va utilitzar una eina matemàtica anomenada *Maple V* que és una eina capaç de resoldre operacions matemàtiques gràcies a un llenguatge de programació fàcil d'interpretar.

Amb les pressions de vapor i les següents condicions d'operació es pot realitzar el càlcul:

- Temperatura de treball: 363 K.
- Pressió de treball: 101,33 kPa.
- Composicions d'aliment:

Tabla 13: Composicions d'aliment en kilomols

Compost	xf
Aigua	0,4952
Benzè	0,1996
Toluè	0,0071
Ciclohexà	0,151
Metanol	0,1413
Etilenglicol	0,0042
Fenol	0,0016

- És una mescla real, en la que s'ha aplicat un factor corrector, el qual és el coeficient d'activitat i aquest és de 0,9.

S'escull un valor de 0,9 per la impossibilitat d'aplicar el model de Wilson.

Mitjançant imatges del programa escollit per calcular les composicions, *Maple V*, es pot observar com s'han realitzat els càlculs:

```

[ > restart;
[ > T:=363;
[                                     T:= 363
[ > P:=101.33;
[                                     P = 101.33
[ > Coef:=0.9;
[                                     Coef:= .9
[ > Xaf:=0.4952;
[                                     Xaf:= .4952
[ > Xbf:=0.1996;
[                                     Xbf:= .1996
[ > Xtf:=0.0071;
[                                     Xtf:= .0071
[ > Xcf:=0.1510;
[                                     Xcf:= .1510
[ > Xmf:=0.1413;
[                                     Xmf:= .1413
[ > Xef:=0.0042;
[                                     Xef:= .0042
[ > Xff:=0.0016;
[                                     Xff:= .0016

```

Figura 7: Introducció dades a Maple V. Font Maple V

En aquesta primera figura de *Maple V*, hi ha l'inici del programa realitzat.

- En primer lloc, es col·loca la funció *RESTART* que fa que el programa oblidés totes les variables que es tenien assignades anteriorment

Exemple:

```

[ > restart;
[ > t:=1;
[                                     t := 1
[ > t;
[                                     1
[ > restart;
[ > t;
[                                     t

```

Figura 8: Funció *RESTART* a Maple V. Font: Maple V

Com es pot observar, quan es col·loca la funció *RESTART* el programa deixa de recordar que havíem assignat la variable *t* a 1.

- Posteriorment, s'assigna el valor de la temperatura d'operació, la pressió, el coeficient d'activitat i les composicions de l'aliment.

```

[ > G:=evalf(ln(T));
[
[ > aa:=65.9278:
[ > ab:=-7227.53:
[ > ac:=0:
[ > ad:=-7.17695:
[ > ae:=4.03e-6:
[ > af:=2:
[ > ba:=1.7e2:
[ > bb:=-1.03e4:
[ > bc:=0:
[ > bd:=-2.36e1:
[ > be:=2.09e-5:
[ > bf:=2:
[ > ta:=7.65e1:
[ > tb:=-7e3:
[ > tc:=0:
[ > td:=-9.1635:
[ > te:=6.23e-6:
[ > tf:=2:
[ > ca:=7.1e1:
[ > cb:=-6.19e3:
[ > cc:=0:
[ > cd:=-8.46523:
[ > ce:=6.45e-6:
[ > cf:=2:
[ > ma:=5.98e1:
[ > mb:=-6.28e3:
[ > mc:=0:
[ > md:=-6.37873:

```

G := 5.894402834

Figura 9: Introducció de dades a Maple V. Font: Maple V

```

[ > me:=4.62e-6:
[ > mf:=2:
[ > ea:=5.79e1:
[ > eb:=-8.86e3:
[ > ec:=0:
[ > ed:=-5.7166:
[ > ee:=3.11e-6:
[ > ef:=2:
[ > fa:=1.29e2:
[ > fb:=-1.17e4:
[ > fc:=0:
[ > fd:=-1.64e1:
[ > fe:=7.85e-6:
[ > ff:=2:

```

Figura 10: Introducció de dades a Maple V. Font Maple V

- A les figures 9 i 10, es pot observar que s'han definit les constants de l'equació d'Antoine per trobar les pressions de vapor.
- El primer que s'ha definit a la figura 9, la lletra G és l'avaluació del logaritme neperià de la temperatura de operació que després haurà de ser utilitzat a la resolució de l'equació d'Antoine.

- La primera lletra és la primera lletra de cada compost de la mescla i la segona lletra és la constant.
- Per exemple: *ae*: a de aigua i la constant de l'equació E.

```

> lnpa:=aa+(ab/(T+ac))+ad*(G)+ae*(T^af);
> lnpb:=ba+(bb/(T+bc))+bd*(G)+be*(T^bf);
> lnpt:=ta+(tb/(T+tc))+td*(G)+te*(T^tf);
> lnpc:=ca+(cb/(T+cc))+cd*(G)+ce*(T^cf);
> lnpm:=ma+(mb/(T+mc))+md*(G)+me*(T^mf);
> lnpe:=ea+(eb/(T+ec))+ed*(G)+ee*(T^ef);
> lnpf:=fa+(fb/(T+fc))+fd*(G)+fe*(T^ff);

```

lnpa := 4.24444368
lnpb := 5.2714096
lnpt := 4.02381394
lnpc := 4.90009275
lnpm := 5.50969311
lnpe := .20614485
lnpf := 1.13477521

Figura 11: Resolució de l'Equació d'Antoine a Maple V. Font: Maple V

- A la figura 11 es pot veure resolta l'equació d'Antoine per a cada compost.

```

> Pa:=exp(lnpa);
> Pb:=exp(lnpb);
> Pt:=exp(lnpt);
> Pc:=exp(lnpc);
> Pm:=exp(lnpm);
> Pe:=exp(lnpe);
> Pf:=exp(lnpf);

```

Pa := 69.71696441
Pb := 194.6902044
Pt := 55.91395214
Pc := 134.3022356
Pm := 247.0752905
Pe := 1.228931202
Pf := 3.110474261

Figura 12: Pressions de vapor per cada compost a Maple V. Font: Maple V

- Després de resoldre el logaritme neperià, ja es troba la pressió de vapor de cada component de la mescla.

> Ka:=Coef*(Pa/P);	$Ka := .6192170924$
> Kb:=Coef*(Pb/P);	$Kb := 1.729213303$
> Kt:=Coef*(Pt/P);	$Kt := .4966205164$
> Kc:=Coef*(Pc/P);	$Kc := 1.192855147$
> Km:=Coef*(Pm/P);	$Km := 2.194490886$
> Ke:=Coef*(Pe/P);	$Ke := .01091520855$
> Kf:=Coef*(Pf/P);	$Kf := .02762683149$

Figura 13: Condició d'equilibri a Maple V. Font: Maple V

- Definits els càlculs de la condició d'equilibri per a cada component.

> A:=Xaf/(1-q*(1-(1/Ka)));	$A := \frac{.4952}{1 + .614942501 q}$
> B:=Xbf/(1-q*(1-(1/Kb)));	$B := \frac{.1996}{1 - .4217023439 q}$
> T:=Xtf/(1-q*(1-(1/Kt)));	$T := \frac{.0071}{1 + 1.013609923 q}$
> C:=Xcf/(1-q*(1-(1/Kc)));	$C := \frac{.1510}{1 - .1616752440 q}$
> M:=Xmf/(1-q*(1-(1/Km)));	$M := \frac{.1413}{1 - .5443134413 q}$
> E:=Xef/(1-q*(1-(1/Ke)));	$E := \frac{.0042}{1 + 90.61529030 q}$
> F:=Xff/(1-q*(1-(1/Kf)));	$F := \frac{.0016}{1 + 35.19669524 q}$

Figura 14: Definir q per a cada compost a Maple V. Font: Maple V

- Es defineix per a cada component l'equació per trobar q.

```

> H:=A+B+T+C+M+E+F-1=0;
      H:= $\frac{.4952}{1+.614942501q} + \frac{.1996}{1-.4217023439q} + \frac{.0071}{1+1.013609923q} + \frac{.1510}{1-.1616752440q} + \frac{.1413}{1-.5443134413q} + \frac{.0042}{1+90.61529030q} + \frac{.0016}{1+35.19669524q} - 1 = 0$ 
> solve({H},{q});
      {q=0}, {q=-.9974685912}, {q=-.05824604707}, {q=-.02201601405}, {q=.5364651592}, {q=2.079731447}, {q=5.348593207}
> Q:=0.5365;
      Q:=.5365

```

Figura 15: Resolució de q a Maple V. Font: Maple V

- Es defineix l'equació, la qual s'ha parlat anteriorment i ja es podrà saber el valor de q:

$$g(q) = \sum_{i=1}^c \frac{x_{0i}}{1 - q[1 - \frac{1}{K_i}]} - 1 = 0$$

- Al resoldre l'equació, surten diversos valors factibles per a la lletra q en la resolució de l'equació, però en aquest cas, l'únic valor útil i coherent és el que està entre 0 i 1.

```

> Ya:=Xaf/(1-Q*(1-(1/Ka)));
      Ya:=.3723541616
> Yb:=Xbf/(1-Q*(1-(1/Kb)));
      Yb:=.2579622276
> Yt:=Xtf/(1-Q*(1-(1/Kt)));
      Yt:=.004599036191
> Yc:=Xcf/(1-Q*(1-(1/Kc)));
      Yc:=.1653415198
> Ym:=Xmf/(1-Q*(1-(1/Km)));
      Ym:=.1995830822
> Ye:=Xef/(1-Q*(1-(1/Ke)));
      Ye:=.00008465164284
> Yf:=Xff/(1-Q*(1-(1/Kf)));
      Yf:=.00008047064464

```

Figura 16: Valors de la fracció vapor a Maple V. Font: Maple V

> $X_a := Y_a / K_a ;$	$X_a := .6013305611$
> $X_b := Y_b / K_b ;$	$X_b := .1491789516$
> $X_t := Y_t / K_t ;$	$X_t := .009260664912$
> $X_c := Y_c / K_c ;$	$X_c := .1386098892$
> $X_m := Y_m / K_m ;$	$X_m := .09094732791$
> $X_e := Y_e / K_e ;$	$X_e := .007755384833$
> $X_f := Y_f / K_f ;$	$X_f := .002912771400$
.	

Figura 17: Valors de la fracció líquida a Maple V. Font: Maple V

- En les figures 16 i 17 s'observa com es van obtenint les composicions en la fase vapor i en la fase líquida.

Finalment, s'han calculat les composicions de la fase líquida i vapor i també els cabals que circularan per cadascuna de les fases:

- El cabal de líquid L serà de 53,65 kmol/h.
- El cabal de vapor V serà de 46,35 kmol/h.
- Composicions:

Tabla 14: Composicions a l'aliment, vapor i líquid en kmols

Compost	xf	x	y
Aigua	0,4952	0,60133	0,37236
Benzè	0,1996	0,14918	0,25796
Toluè	0,0071	0,00926	0,0046
Ciclohexà	0,151	0,13861	0,16534
Metanol	0,1413	0,09095	0,19958
Etilenglicol	0,0042	0,00776	0,00008
Fenol	0,0016	0,00291	0,00008

Com es pot observar a la taula, s'ha aconseguit una separació en la qual gairebé s'eliminen fenol i etilenglicol de la fase vapor.

9.1.2. Temperatura d'aliment

Per trobar el valor de temperatura d'entrada i pressió de l'aliment es va realitzar mitjançant càlcul manual. A continuació, les equacions:

$$\begin{aligned}h_F = & \left(\left(0,4952 \text{ kmol} \cdot 76,01 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (T_f - 273)K \right) \right. \\ & + \left(0,1996 \text{ kmol} \cdot 153,32 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (T_f - 273)K \right) \\ & + \left(0,0071 \text{ kmol} \cdot 180,03 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (T_f - 273)K \right) \\ & + \left(0,1510 \text{ kmol} \cdot 186,31 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (T_f - 273)K \right) \\ & + \left(0,1413 \text{ kmol} \cdot 101,18 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (T_f - 273)K \right) \\ & + \left(0,0042 \text{ kmol} \cdot 172,74 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (T_f - 273)K \right) \\ & \left. + \left(0,0016 \text{ kmol} \cdot 220,19 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (T_f - 273)K \right) \right)\end{aligned}$$

$$h_F = 113,028T_F - 30856.67 \text{ kJ/K}$$

$$\begin{aligned}h_L = & \left(\left(0,60133 \text{ kmol} \cdot 76,01 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (363 - 273)K \right) \right. \\ & + \left(0,14918 \text{ kmol} \cdot 153,32 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (363 - 273)K \right) \\ & + \left(0,00926 \text{ kmol} \cdot 180,027 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (363 - 273)K \right) \\ & + \left(0,13861 \text{ kmol} \cdot 186,31 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (363 - 273)K \right) \\ & + \left(0,09095 \text{ kmol} \cdot 101,18 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (363 - 273)K \right) \\ & + \left(0,00776 \text{ kmol} \cdot 172,74 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (363 - 273)K \right) \\ & \left. + \left(0,00291 \text{ kmol} \cdot 220,19 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (363 - 273)K \right) \right)\end{aligned}$$

$$h_L = 9652.89 \text{ kJ}$$

$$\begin{aligned}
H_V = & \left(\left(0,37236 \text{ kmol} \right. \right. \\
& \cdot \left(76,01 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (373 - 273)K + 40805,32 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} + 34,027 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \right. \\
& \left. \left. \cdot (363 - 373)K \right) \right) \\
& + \left(0,25796 \text{ kmol} \right. \\
& \cdot \left(153,32 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (353,1 - 273)K + 30759,79 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} \right. \\
& \left. \left. + 105,73 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (363 - 353,1)K \right) \right) \\
& + \left(0,0046 \text{ kmol} \right. \\
& \cdot \left(180,03 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (384 - 273)K + 33410,24 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} + 132,15 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \right. \\
& \left. \left. \cdot (363 - 384)K \right) \right) \\
& + \left(0,16534 \text{ kmol} \right. \\
& \cdot \left(186,31 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (354 - 273)K + 29954,91 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} + 137,60 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \right. \\
& \left. \left. \cdot (363 - 354)K \right) \right) \\
& + \left(0,19958 \text{ kmol} \right. \\
& \cdot \left(101,18 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (337,65 - 273)K + 35154,13 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} \right. \\
& \left. \left. + 49,53 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (363 - 337,65)K \right) \right) \\
& + \left(0,00008 \text{ kmol} \cdot (172,74 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (470,25 - 273)K \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + 53183,73 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} + 90,12 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (363 - 470,25)K \Big) \\
& + \left(0,00008 \text{ kmol} \right. \\
& \cdot \left(220,19 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (454,85 - 273)K + 46488,78 \frac{\text{kJ}}{\text{kmol}} \right. \\
& \left. \left. + 127,73 \frac{\text{kJ}}{\text{kmolK}} \cdot (363 - 454,85)K \right) \right)
\end{aligned}$$

$$V \cdot H_V + L \cdot h_L - F \cdot h_F = 0$$

$$11015,23 \text{ kJ} + 5178,78 \text{ kJ} - (113,028T_F - 30856,665) \text{ kJ/K} = 0$$

$$T_F = 416,27 \text{ K}$$

Pel que fa a la pressió, es realitza el sumatori de l'equació de Raoult modificada tal i com mostra la taula:

Tabla 15: Càlcul de la pressió en l'aliment en kPa

Temperatura equilibri	x _F (kmols)	P ⁰ (kPa)	P ⁰ ·x _F ·γ (kPa)	γ (Coeficient activitat)
416,27	0,4952	394,299264	175,731296	0,9
	0,1996	504,698248	90,6639932	
	0,0071	234,544448	1,49873903	
	0,151	480,913365	65,3561263	
	0,1413	1178,338	149,849243	
	0,0042	15,1029153	0,05708902	
	0,0016	30,8273067	0,04439132	
			483,200878	

I com ja s'havia expressat abans, la pressió en unitats d'atmosferes és 4,77.

Ara ja podem afirmar que la variació de pressió serà de 4,77 atm a 1 atm.

9.1.3. Dimensionat del separador flash

L'operador flash haurà de tenir un volum suficient per garantir tot el cabal que entri contínuament.

El volum necessari per la operació horària serà:

$$100 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \cdot \frac{42,805 \text{ kg}}{1 \text{ kmol}} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{745,77 \text{ kg a } 416,27 \text{ K}} = 5,74 \text{ m}^3$$

Aquest volum es pot arrodonir a 6 m^3 . Per tant, utilitzant el volum d'un cilindre:

$$V = \pi r^2 h$$

Provant amb una alçada del tanc de 3 m:

$$6 \text{ m}^3 = \pi \cdot r^2 \cdot 3 \text{ m}$$

$$r = 0,8 \text{ m}$$

Les dimensions del separador flash seran de 3 metres d'alçada i 0.8 metres de radi.

9.2. Intercanviador de calor

9.2.1. Descripció de l'intercanviador

Es volen escalfar els 100 kmol/h de mescla, que seran 4280.52 kg/h , de 298 K (temperatura ambient) fins a la temperatura d'entrada a tanc flash, que és 416.27 K .

Per realitzar aquesta operació, s'utilitzarà vapor d'aigua a 500 K que baixarà la seva temperatura fins a 410 K .

S'utilitzarà un intercanviador de carcassa i tubs 1-1 en el que la mescla passarà pels tubs i el vapor d'aigua per la carcassa.

El fluid 1 serà l'aigua i el fluid 2 serà l'aliment.

9.2.2. Dimensionat

Primerament es calcularà la quantitat de calor de l'aliment.

$$q = W_2 \cdot C_p \cdot (T_{20} - T_{2i})$$

Les dades per trobar la capacitat calorífica de la mostra estan extretes del *Perry's Chemical Engineers' Handbook*.

Primer, es busquen les dades per a la temperatura de 298 K:

Tabla 16: C_p per a 298 K

Compost	xf(kmols)	J/kmolK (298K)	$C_p \cdot xf$ (J/kmolK)
Aigua	0,4952	75386,65334	37331,47073
Benzè	0,1996	136130,3585	27171,61955
Toluè	0,0071	156473,38	1110,960998
Ciclohexà	0,151	154794,0413	23373,90024
Metanol	0,1413	81144,7316	11465,75058
Etilenglicol	0,0042	149284,1326	626,9933568
Fenol	0,0016	196367,78	314,188448
		SUMA	101394,8839

I les dades per a la temperatura de 416,17 K:

Tabla 17: C_p per a 416,27 K

Compost	xf(kmols)	C_p J/kmolK (416,27K)	$C_p \cdot xf$ (416,27)
Aigua	0,4952	77369,27886	38313,26689
Benzè	0,1996	167614,2698	33455,80825
Toluè	0,0071	197172,1745	1399,922439
Ciclohexà	0,151	215743,1833	32577,22067
Metanol	0,1413	117534,4985	16607,62464
Etilenglicol	0,0042	185325,738	778,3680997
Fenol	0,0016	233931,5147	374,2904235
		SUMA	123506,5014

Amb les dues dades obtingudes a les 2 temperatures es calcula la C_p mitjana:

$$C_p = \frac{101394,88 + 123506,50}{2} = 112450,69 \frac{J}{molK}$$

Realitzem l'oportú canvi de unitats i ens queda una Cp de :

$$C_p = 2,627 \frac{kJ}{kgK}$$

$$q = 4280,52 \frac{kg}{h} \cdot 2,627 \frac{kJ}{kgK} \cdot (416,27 - 298)K$$

$$q = 1329937,403 \text{ kJ/h}$$

Amb la calor obtinguda, ja es pot calcular el cabal màssic que es necessitarà de vapor d'aigua:

$$q = W_1 \cdot C_p \cdot (T_{1i} - T_{1o})$$

De igual forma, es calcula la Cp mitjana per el vapor d'aigua.

$$1329937,403 = W_1 \cdot 1,943 \cdot (500 - 410)$$

$$W_1 = 7605,29 \frac{kg}{h}$$

Amb aquestes dades, es passa a calcular l'àrea de pas per l'intercanviador de calor i es calcula de la següent forma:

$$q = U_o \cdot A_o \cdot \Delta t_{log}$$

Per poder realitzar aquest càlcul, ens falten el *coeficient global de transferència de calor* (U_o) i la *variació de temperatura logarítmica* (Δt_{log}).

Per calcular Δt_{log} , s'utilitzarà la següent fórmula:

$$\Delta t_{log} = \frac{(T_1 - T'_2) - (T_2 - T'_1)}{\ln\left(\frac{T_1 - T'_2}{T_2 - T'_1}\right)}$$

On:

T₁: temperatura d'entrada del vapor d'aigua

T₂: temperatura de sortida del vapor d'aigua

T'₁: temperatura d'entrada de l'aliment

T'₂: temperatura de sortida de l'aliment

$$\Delta t_{log} = \frac{(500 - 416,27) - (410 - 298)}{\ln\left(\frac{500 - 416,27}{410 - 298}\right)} = 97,18 \text{ K}$$

Per realitzar el càlcul del *coeficient global de transferència de calor* s'haurà d'utilitzar la següent fórmula:

(suposant incrustacions = 0)

$$U_o = \frac{1}{\frac{D_o}{D_i h_i} + \frac{D_o}{2K} \ln \frac{D_o}{D_i} + \frac{1}{h_o}}$$

On:

D_o: Diàmetre extern del tub

D_i: Diàmetre intern del tub

K: Conductivitat tèrmica del material

h_o: coeficient de convecció a l'exterior

h_i: coeficient de convecció a l'interior

Pel que fa als tubs que s'utilitzaran en l'intercanviador:

S'utilitzaran uns tubs normalitzats de les normatives TEMA d'acer inoxidable extretes del *Handbook Perry*. El tub triat per a aquesta operació és el següent:

- Diàmetre extern de 50,8 mm
- Gruix de 1,24 mm
- Diàmetre intern de 48,32 mm
- Pes del tub de 1.539 kg/m
- Conductivitat de l'acer de 61,2 kJ/hmK

Per conèixer el valor del *coeficient de convecció a l'exterior* al tractar-se de vapor d'aigua es podrà obtenir de taules estandarditzades. En aquest cas del *Recull de dades de l'assignatura Enginyeria del Transport de Fluids i de Transmissió de Calor*.

Aquesta dada serà de:

$$h_o = 10450 \text{ kJ/hm}^2\text{K}$$

I pel que fa a la dada de *coeficient de convecció a l'interior* s'haurà d'obtenir mitjançant càlculs d'equacions empíriques.

S'utilitzarà l'equació empírica per l'escalfament d'un fluid amb la següent fórmula:

$$Nu = 0,023 \cdot (Re)^{0,8} \cdot (Pr)^{0,4}$$

Les sigles *Re* es refereixen al *número de Reynolds* i té la següent fórmula:

$$Re = \frac{u \cdot D_o \cdot \rho}{\mu}$$

On:

u : velocitat del fluid a l'interior dels tubs

μ : viscositat del fluid

ρ : densitat del fluid

La velocitat serà de 1,5 m/s.

Per realitzar el càlcul de la densitat del fluid, s'obtindran les dades del *Perry's Chemical Engineers' Handbook* de la següent manera:

S'obtenen unes constants per a cada compost:

Tabla 18: Constants per al càlcul de la densitat

	C1	C2	C3	C4
Aigua	-13,851	0,64038	-0,00191	1,82E-06
Benzè	1,0259	0,26666666	562,05	0,28394
Toluè	0,8792	0,27136	591,75	0,29241
Ciclohexà	0,88998	0,27376	553,8	0,28571
Metanol	2,3267	0,27073	512,5	0,24713
Etilenglicol	1,315	0,25125	720	0,21868
Fenol	1,3798	0,31598	694,25	0,32768

L'equació descrita en el handbook per l'aigua entre 273,16 i 647,096 K és la següent:

$$\rho = 17,863 + 58,606\tau^{0,35} - 95,396\tau^{\frac{2}{3}} + 213,89\tau - 141,26\tau^{4/3}$$

On:

$$\tau = 1 - \frac{T}{647,096}$$

I l'equació descrita per la resta de compostos és la següent:

$$\rho = \frac{C1}{C2^{[1+(1-\frac{T}{C3})^{C4}]}}$$

Amb això, s'obtenen les següents densitats a 416,27 K:

Tabla 19: Densitats calculades per a cada component

Compostos	Densitat (mol/dm ³)	Pes Molecular	Densitat (g/dm ³)
Aigua	51,298	18	923,362
Benzè	9,472	78,11	739,872
Toluè	8,083	92,14	744,727
Ciclohexà	7,761	84,16	653,160
Metanol	20,397	32,04	653,489
Etilenglicol	16,426	62,07	1019,558
Fenol	10,253	94,11	964,902

Amb el càlcul de les fraccions en pes, es podrà obtenir la densitat en g/dm³:

Tabla 20: Densitats calculades a 416.27 K

Compostos	x _p (fracció en pes)(kg)	Densitat ponderada (g/dm ³)
Aigua	0,208	192,277
Benzè	0,364	269,480
Toluè	0,015	11,382
Ciclohexà	0,297	193,912
Metanol	0,106	69,116
Etilenglicol	0,006	6,209
Fenol	0,003	3,394
	SUMA	745,7708865

Realitzant els mateixos càlculs per a 298 K, s'obté una densitat de:

Tabla 21: Densitats calculades a 298 K

Compostos	Densitat ponderada (g/dm ³)
Aigua	206,967
Benzè	317,997
Toluè	13,206
Ciclohexà	229,569
Metanol	83,523
Etilenglicol	6,762
Fenol	3,770
SUMA	861,795

Realitzant la mitjana oportuna per a aquestes dues densitats, s'obté el següent:

$$\rho = \frac{745.77 + 861.79}{2} = 803.78 \text{ g/dm}^3$$

Per realitzar el càlcul de la viscositat del fluid, s'obtindran les dades del *Perry's Chemical Engineers' Handbook* de la següent manera:

S'obtenen unes constants per a cada compost:

Tabla 22: Constants per el càlcul de la viscositat

compost	C1	c2	c3	c4	c5
aigua	-52,843	3703,6	5,866	-5,79E-29	10
benzè	7,5117	294,68	-2,794	0	0
toluè	-226,08	6805,7	37,542	-0,060853	1
ciclohexà	-33,763	2497,2	3,2236	0	0
metanol	-25,317	1789,2	2,069	0	0
etilenglicol	-20,515	2468,5	1,2435	2,50E+12	-5
fenol	-43,335	3881,7	4,3983	3,05E+24	-10

Per calcular la viscositat es fa segons l'equació:

$$\mu = e^{(C_1 + \frac{C_2}{T} + C_3 \ln T + C_4 T^{C_5})}$$

Es calculen les viscositats a 298 i 416,27 K:

Tabla 23: Viscositats calculades a 298 K i 416.27 K

compost	μ (Pa·s) (298K)	μ (Pa·s) (416.27 K)
aigua	0,00091555	0,00018874
benzè	0,00060088	0,00017832
toluè	0,00055531	0,00017801
ciclohexà	0,00089563	0,00024325
metanol	0,00053906	0,00019549
etilenglicol	0,01685015	0,00102303
fenol	0,00910880	0,00057401

Per una mescla d'hidrocarburs, es pot utilitzar la regla de Kendall i Monroe que diu que:

$$\mu^{1/3} = \sum_{i=1}^n x_{Fi} \mu_i^{1/3}$$

Realitzant aquest càlculs, s'obté una viscositat per a 298 K de:

$$\mu_{298 K} = 0,00077191 \text{ Pa} \cdot \text{s}$$

I per a 416,27 K:

$$\mu_{416.27 K} = 0,00020415 \text{ Pa} \cdot \text{s}$$

Realitzant la mitjana, s'obté una viscositat de:

$$\mu = 0,00048803 \text{ Pa} \cdot \text{s}$$

Un cop calculades la densitat i la viscositat ja es pot obtenir el número de Reynolds, que ens servirà per deduir si el fluid està en regim laminar o turbulent:

$$Re = \frac{1,5 \frac{m}{s} \cdot 48,312 \cdot 10^{-3} m \cdot 803,783 \text{ kg/m}^3}{0,00048803 \frac{kg}{s \cdot m}}$$

$$Re = 119354,4381$$

Com que és més gran que 4000, el fluid estarà en regim turbulent.

Les sigles Pr fan referència al número de Prandtl que té com a equació:

$$Pr = \frac{C_p \cdot \mu}{k}$$

On:

C_p : capacitat calorífica

μ : viscositat

k : conductivitat tèrmica

Per trobar la *conductivitat tèrmica* k es va fer servir la biblioteca del programa informàtic *ASPEN HYSYS*. Col·locant tots els compostos amb la fracció molar corresponent i temperatura corresponent.

Es va obtenir una *conductivitat tèrmica mitjana* de:

$$k = 1,75 \cdot 10^{-4} \text{ kJ/msK}$$

Un cop calculades les dades que faltaven es pot calcular el número de Prandtl:

$$Pr = \frac{2,627 \frac{kJ}{kgK} \cdot 0,00048803 \frac{kg}{ms}}{1,75 \cdot 10^{-4} \text{ kJ/msK}}$$

$$Pr = 7,326$$

Ara que ja es coneixen els dos números adimensionals de Re i Pr, es pot calcular el número de Nusselt per posteriorment obtenir el coeficient de convecció a l'interior dels tubs.

$$Nu = 0,023 \cdot (119354,4381)^{0,8} \cdot (7,326)^{0,4}$$

$$Nu = 587,686$$

Aplicant la fórmula de Nusselt:

$$Nu = \frac{h_i \cdot D_i}{k}$$

La conductivitat tèrmica passarà de segons a hores:

$$0,63 \text{ kJ/hmK}$$

I obtindrem el coeficient de convecció:

$$587.686 = \frac{h_i \cdot 48,312 \cdot 10^{-3} \text{ m}}{0,63 \frac{\text{kJ}}{\text{hmK}}}$$

$$h_i = 7633,57 \text{ kJ/m}^2 \text{ hK}$$

Un cop calculat el coeficient de convecció, ja es pot passar a calcular el *coeficient global de transferència de calor*:

$$U_o = \frac{1}{\frac{D_o}{D_i h_i} + \frac{D_o}{2K} \ln \frac{D_o}{D_i} + \frac{1}{h_o}}$$

$$U_o = \frac{1}{1,377 \cdot 10^{-4} + 2,084 \cdot 10^{-5} + 9,569 \cdot 10^{-5}}$$

$$U_o = 3933,446 \text{ kJ/hm}^2 \text{ K}$$

Ja es tenen totes les dades per calcular l'àrea de pas de calor:

$$A_o = \frac{q}{U_o \cdot \Delta t_{log}}$$

$$A_o = \frac{1329937 \frac{\text{kJ}}{\text{h}}}{3933,446 \frac{\text{kJ}}{\text{hm}^2 \text{ K}} \cdot 97,18 \text{ K}}$$

$$A_o = 3,479 \text{ m}^2$$

Tenint l'àrea de pas, es poden calcular el nombre de tubs i la seva llargada. Per fer-ho s'utilitza la següent equació:

$$A_o = A_{o,tub} \cdot N_{tubs}$$

$$A_o = \pi D_{o,tub} \cdot L_{tub} \cdot N_{tubs}$$

Per poder saber la llargada dels tubs, primer s'ha de saber quin nombre de tubs es necessitarà. I es podrà saber relacionant el nombre de tubs amb el cabal màssic i volumètric del fluid.

$$G_2 = G_{tub} \cdot N_{tub}$$

$$W_2 = W_{tub} \cdot N_{tub}$$

$$W_2 = G_{2,tub} \cdot \rho \cdot N_{tub}$$

$$W_2 = u \cdot \frac{\pi \cdot D_i^2}{4} \rho \cdot N_{tub}$$

$$4280,52 \frac{kg}{h} \cdot \frac{1 h}{3600 s} = 1,5 \frac{m}{s} \cdot \frac{\pi \cdot (48,312 \cdot 10^{-3})^2}{4} m^2 \cdot \frac{807,33 kg}{m^3} \cdot N_{tubs}$$

$$N_{tubs} = 1,85 tubs = 2 tubs$$

Ara, ja es pot trobar la llargada:

$$A_o = \pi \cdot 50,80 \cdot 10^{-3} m \cdot L_{tub} \cdot 2 tubs$$

$$L_{tub} = \frac{3,479 m^2}{\pi \cdot 50,80 \cdot 10^{-3} m \cdot 2 tubs}$$

$$L_{tubs} = 10,9 m$$

És un intercanviador amb 2 tubs de gairebé 11 metres. De cara a problemes d'espai en la instal·lació de la planta es podria intentar augmentar aquest número de tubs, reduint la llargada.

9.3. Altres equips

9.3.1. Tanc d'emmagatzematge

El tanc d'inici d'operació haurà de tenir un volum suficient per garantir un dia sencer de treball continu. Per tant, calculant el cabal que es necessitarà durant un dia podrem establir les seves dimensions.

El volum necessari per un dia serà:

$$100 \frac{\text{kmol}}{\text{h}} \cdot \frac{42,805 \text{ kg}}{1 \text{ kmol}} \cdot \frac{24 \text{ h}}{1 \text{ dia}} \cdot \frac{1 \text{ m}^3}{861,79 \text{ kg a } 298 \text{ K}} = 119,21 \text{ m}^3$$

Aquest volum es pot arrodonir a 120 m^3 . Per tant, utilitzant el volum d'un cilindre:

$$V = \pi r^2 h$$

Provant amb una alçada del tanc de 15 m:

$$120 \text{ m}^3 = \pi \cdot r^2 \cdot 15 \text{ m}$$

$$r = 1,5958 = 1,6 \text{ m}$$

Les dimensions del tanc d'inici seran de 15 metres d'alçada i 1.6 metres de radi

9.3.2. Canonades

És important saber si el procés que s'està duent a terme necessitarà d'una bomba o no. Es volen instal·lar canonades de 2 " i es vol que la velocitat de l'aliment sigui de 1,5 m/s.

El diagrama de flux amb tots els equips és el següent:

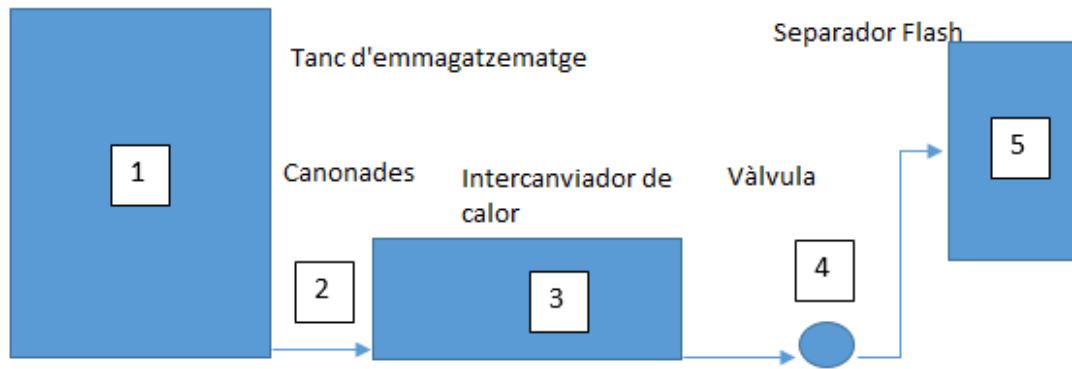


Figura 18: Diagrama de flux amb canonades

1→ És el tanc d'emmagatzematge. Té una alçada de 15 m i una amplada de 3,2 m

2→ Canonada de 2 " amb una llargada de 4 metres.

3→ l'Intercanviador de calor que constarà de 13 metres aproximadament de llargada ja que els tubs fan 11 metres.

4→ El tram que porta el procés de l'intercanviador de calor fins el separador flash consta d'un primer tram de 1 metre de canonada fins a la vàlvula, la vàlvula, 1 tram de 1 metre de canonada, un colze, un tram de 5 metres, un colze i finalment un tram de 0.5 metres que ja porta cap al separador flash.

5→ El separador flash que consta d'una alçada de 3 metres, l'aliment entrarà per el punt mig d'aquesta alçada i d'aquesta manera, el separador flash quedarà a 3,5 metres de terra. En aquest tros s'haurà de col·locar el suport que aguantarà el separador flash.

Per realitzar els càlculs s'ha de plantejar l'equació de Bermouilli entre dos punts. Els dos punts triats són el dipòsit d'emmagatzematge i el separador flash:

$$\frac{P_{atm}}{\rho g} + z_1 + \frac{u_1^2}{2g} + \frac{P_1}{\rho g} = \frac{P_{atm}}{\rho g} + z_2 + \frac{u_2^2}{2g} + \frac{P_2}{\rho g} + h_{f1-2} \quad [8.5.1]$$

Les velocitats s'anul·laran donat que els fluids en aquests dos punts estan parats.

Les pressions s'anul·laran ja que són idèntiques en els dos equips, 1 atm.

Finalment, quedarà:

$$15 = 1,5 + h_{f1-2}$$

S'haurà de realitzar el càlcul de pèrdues de càrrega per comprovar si es necessitarà la col·locació d'una bomba.

Els càlculs de pèrdua de càrrega es realitzen amb la següent equació:

$$h_{f1-2} = f \cdot \frac{L}{D} \cdot \frac{u^2}{2g} \quad [8.5.2]$$

Per calcular f , que és el coeficient de fricció, es necessitarà el número de Reynolds:

$$Re = \frac{1,5 \cdot 0,0525 \cdot 861,79}{0,00077191} = 87920,31$$

També serà necessari calcular la rugositat relativa, que es trobarà tabulada al llibre *Enginyeria del Transport de Fluids i Transmissió de Calor: Recull de dades* en una gràfica que mostra la rugositat relativa en funció del material de la canonada i del diàmetre.

Agafant acer com a material, s'obté una rugositat relativa de:

$$\frac{\varepsilon}{D} = 0,0009$$

Amb aquests dos valors, en una gràfica que mostra el número de Reynolds en front de la rugositat relativa i en front del coeficient de fricció f , trobem el coeficient de fricció f que serà de **0,022**.

Pel que fa a L que és la longitud útil a l'equip, es necessitarà saber la longitud equivalent en els equips. Tabulats en aquest mateix llibre citat abans, es troben les següents longituds:

Vàlvula → 4,5 m

Colzes → 2 x 4m = 8 m

Embocadura → 1 m

Eixamplament → 1,7 m

Sumant aquestes longituds i les distàncies dites abans, fan un total de 39,7 m.

Aplicant aquests resultats a l'equació de les pèrdues de càrrega:

$$h_{f1-2} = 0,022 \cdot \frac{39,7}{0,0525} \cdot \frac{1,5^2}{2 \cdot 9,81} = 1,908 \text{ m}$$

L'alçada del tanc és més alta que l'alçada del punt 2 de l'equació de Bernouilli més les pèrdues de càrrega, per tant no caldrà l'ús de bomba.

9.3.3. Vàlvula reductora de pressió

S'utilitzarà una vàlvula pilotada de la marca 'Aerre'.

- Vàlvula pilotada:

Utilitzen un diafragma metàl·lic com a sensor de la pressió regulada, que actua sobre una petita vàlvula pilot que a la vegada controla el moviment de la vàlvula principal.

La senyal de pressió es conduïda a través de canals interns a la càmera del diafragma, que actua equilibrant la força d'un ressort antagonic, el punt del registre es determina mitjançant un cargol regulador.

El plançó de la vàlvula pilot, solidari al diafragma, modularà d'acord amb els moviments d'aquest el pas regulat del fluid a la càmera del pistó principal, provocant el desplaçament de l'obturador.

Aquest mecanisme, permet amplificar les variacions de la pressió controlada, obtenint com a resultat, si la vàlvula està correctament dimensionada, l'apertura de la vàlvula principal necessària per establir el sistema.



Figura 19: Vàlvula reductora de pressió 'aerre'. Font: Aerre.

El model AR-10 de vàlvula és un model destinat a treballar amb temperatures des de 363 K fins a 503 K i es capaç de reduir fins a 27 atm la pressió.

La pressió de l'aliment ha de baixar de 4,77 atm fins a 1 atm, així que aquesta vàlvula és correcte per aquesta operació.

10. Resultats

Els resultats obtinguts deixen portes obertes de cara a continuacions per assolir l'objectiu d'aconseguir una recuperació total.

Si es torna a observar el diagrama de flux es pot comprovar que s'han resolt les diferents parts que el contenen:

- Primerament, s'ha resolt el tanc que contindrà l'aliment:

Aquest tanc serà un dipòsit cilíndric de 15 metres d'alçada i 1,6 metres de radi. Serà capaç d'acumular un volum d'aliment d'aproximadament 120 m³.

Aquest aliment, dins del tanc tindrà les següents condicions:

- Una temperatura de 25 °C.
- Una pressió de 1 atm.
- Estarà en estat líquid.
- Tindrà les següents composicions molars:

Tabla 24: Composicions de l'aliment en kmols

Compostos	xf
Aigua	0,4952
Benzè	0,1996
Toluè	0,0071
Ciclohexà	0,1510
Metanol	0,1413
Etilenglicol	0,0042
Fenol	0,0016

- S'han resolt el disseny tèrmic i dimensional del intercanviador de calor:
 - És un intercanviador de carcassa i tubs 1:1, és a dir, que realitza una passada per tubs i una passada per la carcassa
 - Té un àrea de transferència de 3,749 m².
 - Té una llargada de tubs de 10,9 metres.
 - Constarà de 2 tubs.
 - Tindrà les següents variacions de temperatura:

Tabla 25: Temperatures a l'intercanviador de calor en °C

Aigua	Aliment
t° entrada	t° entrada
227	25
t° sortida	t° sortida
137	143.27

- S'han resolt les característiques de l'operació flash:
 - Es treballarà a una temperatura de 90 °C.
 - A una pressió de 1 atm.
 - Es treballarà amb un cabal de 100 kmol/h.
 - S'obtidran dos cabals, un líquid de 53,65 kmol/h i un vapor de 46,35 kmol/h.
 - Tindrà un volum de 6 m³ que serà suficient per treballar en continu.
 - L'operador flash serà de forma cilíndrica i tindrà una alçada de 3 metres i un radi de 0,8 metres.
 - Es produirà la següent separació flash:

Tabla 26: Composicions d'entrada i sortida del separador flash en kmols

Compost	xf	x	y
Aigua	0,4952	0,60133	0,37236
Benzè	0,1996	0,14918	0,25796
Toluè	0,0071	0,00926	0,0046
Ciclohexà	0,151	0,13861	0,16534
Metanol	0,1413	0,09095	0,19958
Etilenglicol	0,0042	0,00776	0,00008
Fenol	0,0016	0,00291	0,00008

Com es pot comprovar a la taula, s'ha aconseguit realitzar una separació flash. El grau de separació no és molt gran, però això, és el que permeten els processos flash industrialment. Són processos econòmics i per aquest motiu s'utilitzen.

- S'ha resolt la vàlvula necessària per portar a terme la baixada de pressió abans de l'entrada al separador flash. Aquesta vàlvula serà una AR10 amb les següents característiques:
 - Pot treballar entre temperatures de 90 °C i 230 °C.
 - Pot realitzar baixades de pressió de fins a 27 atm.

- S'ha vist quina dimensió han de tenir les canonades:
 - Les canonades seran de 2"
 - Hi haurà 4 trams de canonades. El primer, uneix tanc d'emmagatzematge amb l'intercanviador de calor i és de 4 metres. El segon tram és d'1 metre i uneix intercanviador de calor i vàlvula. El tercer uneix vàlvula i colze i és d'1 metre. El quart uneix els dos colzes i és de 5 metres. I l'últim és de mig metre unint el colze amb el separador flash.

A continuació, es col·loca el diagrama de flux amb una taula resum dels resultats:

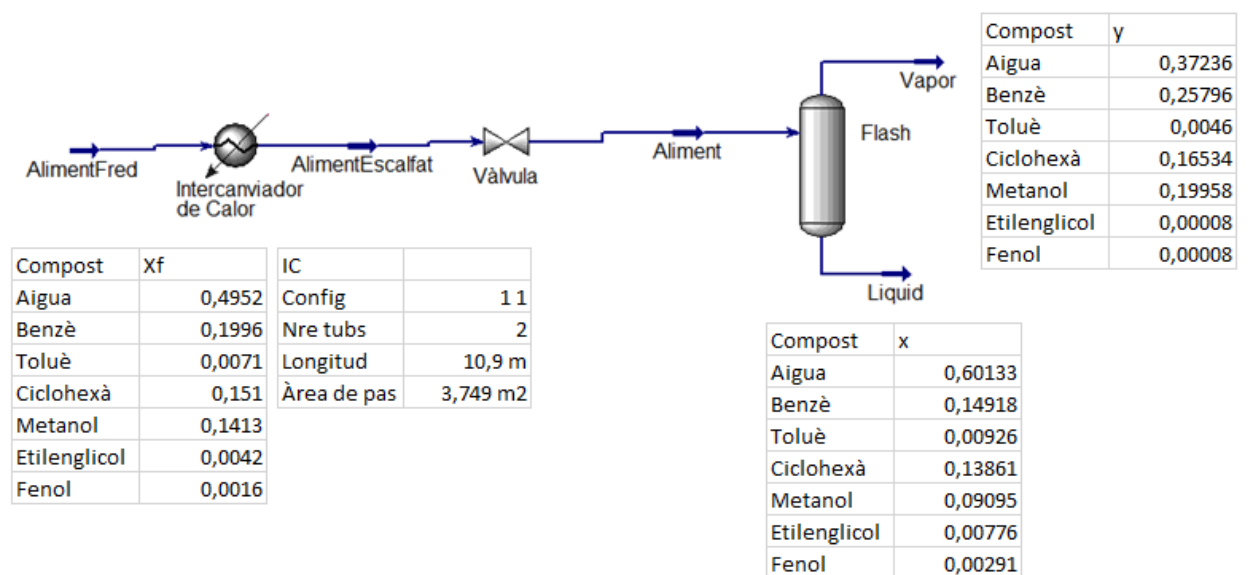


Figura 20: Taula resum de resultats en fraccions kilomolars

11. Conclusions

A l'inici del treball s'havien plantejat els següents objectius:

- Estudiar la separació flash d'una mescla multicomponent per la posterior recuperació.
- Emprar una tecnologia econòmica en aquesta separació: la evapo-oxidació.
- Calcular el disseny tèrmic i les dimensions d'una planta per dur a terme el procés.

A l'acabar el treball s'extreuen unes conclusions següents:

- S'ha aconseguit dur a terme la separació flash d'una mescla multicomponent de tal manera que, dos components inicialment a l'aliment com eren l'etilenglicol i el fenol han estat practimanet eliminats de la part de vapor.
- Inicialment el nombre de compostos era de set, i ara, amb aquesta separació, a la part de vapor s'ha reduït a cinc.
- Les condicions de treball són molt assequibles. Temperatura de treball de 90 °C, i a una pressió de treball de 1 atm.
- S'ha treballat la primera part del procés de l'evapo-oxidació.

12. Treball de futur

Un cop resumits els resultats obtinguts, es poden plantejar futures hipòtesis de cara a seguir treballant en el problema.

- S'hauria de realitzar una curiosa experimentació per a poder conèixer el millor coeficient d'activitat possible a partir dels diferents models termodinàmics.
- Una de les primeres hipòtesis centrant-se en el corrent de vapor seria intentar eliminar el toluè realitzant una segona operació flash. Aquest fet, deixaria una mescla quaternària entre aigua, benzè, ciclohexà i metanol.
- Com a segona opció en el que és la fase vapor, seria introduir-la en un forn per cremar-la aprofitant així el calor per escalfar l'aigua entrant a l'intercanviador de calor.
- Un altre hipòtesis, treballant en el corrent líquid seria l'intent de dur a terme una rectificació industrial per intentar realitzar una separació de tots i cada un d'ells.
- Es podria seguir treballant aplicant tècniques de membrana per a intentar separar els compostos que haurien arribat a un punt difícil de separar mitjançant destil·lació. Tocaria un important treball d'investigació per poder realitzar una bona separació d'aquests compostos.
- La línia biotecnològica seria una línia molt important d'investigació per a aquest procés on, les tècniques convencionals de separació podrien quedar obsoletes.

13. Índex de figures

Figura 1: Diagrama de flux Distiller, S.A. Font: Distiller, S.A.....	11
Figura 2: Diagrama d'equilibri en una mescla binària	15
Figura 3: Diagrama de flux evapo-oxidació	21
Figura 4: Esquema destil·lació flash. Font: Google imatges	22
Figura 5: Intercanviador carcassa i tubs. Font: Google imatges.....	25
Figura 6: Diagrama de flux. Font: Hysys	41
Figura 7: Introducció dades a Maple V. Font Maple V	45
Figura 8: Funció RESTART a Maple V. Font: Maple V	45
Figura 9: Introducció de dades a Maple V. Font: Maple V	46
Figura 10: Introducció de dades a Maple V. Font Maple V	46
Figura 11: Resolució de l'Equació d'Antoine a Maple V. Font: Maple V	47
Figura 12: Pressions de vapor per cada compost a Maple V. Font: Maple V.....	47
Figura 13: Condició d'equilibri a Maple V. Font: Maple V.....	48
Figura 14: Definir q per a cada compost a Maple V. Font: Maple V	48
Figura 15: Resolució de q a Maple V. Font: Maple V.....	49
Figura 16: Valors de la fracció vapor a Maple V. Font: Maple V	49
Figura 17: Valors de la fracció líquida a Maple V. Font: Maple V.....	50
Figura 18: Diagrama de flux amb canonades	67
Figura 19: Vàlvula reductora de pressió 'aerre'. Font: Aerre	69
Figura 20: Taula resum de resultats en fraccions kilomolars	73

14. Índex de taules

Tabla 1: Components triats i els seus grups	28
Tabla 2: TWA, STEL y VLA	30
Tabla 3: Composició de l'aliment en fracció kilomolar	31
Tabla 4: Dades físiques de l'aliment	31
Tabla 5: Contaminants específics. Font: PSARI 2003	33
Tabla 6: Contaminants específics 2. Font: PSARI 2003.....	33
Tabla 7: Constants per al càlcul de la densitat	34
Tabla 8: Càlcul de la massa molar.....	35
Tabla 9: Contaminants específics 3. Font: Normativa PSARI 2003	36
Tabla 10: Nivell qualitat aigua .Font: Normativa PSARI 2003	36
Tabla 11: Constants de l'Equació d'Antoine	42
Tabla 12: Pressions de vapor calculats a 363 K	43
Tabla 13: Composicions d'aliment en kilomols	44
Tabla 14: Composicions a l'aliment, vapor i líquid en kmols	50
Tabla 15: Càlcul de la pressió en l'aliment en kPa.....	53
Tabla 16: Cp per a 298 K.....	55
Tabla 17: Cp per a 416.27 K.....	55
Tabla 18: Constants per al càlcul de la densitat	59
Tabla 19: Densitats calculades per a cada component	60
Tabla 20: Densitats calculades a 416.27 K.....	60
Tabla 21: Densitats calculades a 298 K.....	61
Tabla 22: Constants per el càlcul de la viscositat	61
Tabla 23: Viscositats calculades a 298 K i 416.27 K.....	62
Tabla 24: Composicions de l'aliment en kmols	71
Tabla 25: Temperatures a l'intercanviador de calor en °C.....	72
Tabla 26: Composicions d'entrada i sortida del separador flash en kmols.....	72

15. Bibliografía

1. **Aerre.** aerre.com.ar. [En línea] 1 / julio / 2015. http://www.provindus.com.py/Contenidos/Productos/Aerre/Catalogos/Aerre_Reductora.pdf.
2. **l'Aigua, Agència Catalana de.** Psari 2003. [En línea] 18 / junio / 2015. https://aca-web.gencat.cat/aca/documents/ca/planificacio/psari/psari2003_090703.pdf.
3. **Banderas, Antonio Valiente.** *Destilación Instantánea o Flash*. s.l. : UNAM, CU, 2010.
4. **Bonsfills, A.** *Enginyeria del Transport de Fluids i Transmissió de Calor: Recull de dades*. Manresa : Departament d'Enginyeria Minera i Recursos Naturals, 2013.
5. **Cruz Fierro.** Cruz Fierro. [En línea] 10 / Mayo / 2015. <http://tecno.cruzfierro.com/formularios/estimacion/viscosidad-rev5>.
6. **Don W. Green, Robert H. Perry.** *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. s.l. : McGraw-Hill, 1934.
7. **Ecuador, Universidad Central de.** Wiki Estudiantil. [En línea] 1 / julio / 2015. <https://simulacionprocesos.wikispaces.com/introducci%C3%B3n+Hysys>.
8. **Envitech, Condorchem.** Condorchem. [En línea] 29 / abril / 2015. <http://blog.condorchem.com/tag/evapo-oxidacion/>.
9. **Mendoza, Francisco García.** *Diseño de la sección de purificación de una planta de producción de MTBE*. Cartagena : Universidad Politécnica de Cartagena, 2008.
10. **Ministerio de Empleo y Seguridad Social.** Instituto Nacional de Seguridad e Higiene en el Trabajo. [En línea] 2015. <http://www.insht.es/portal/site/Insht/menuitem.a82abc159115c8090128ca10060961ca/?vgnnextoid=4458908b51593110VgnVCM100000dc0ca8c0RCRD>
11. **Novella, E. Costa.** *INGENIERÍA QUÍMICA 5. transferencia de materia. 1a parte*. Madrid : Alhambra. S.A., 1988.
12. **Organismo para la Protección del Medio Ambiente.** Guía del Ciudadano: Atenuación Natural. [En línea] 26 / junio / 2015. <http://www.clu-in.org/download/remed/spannatt.pdf>.
13. **Smallwood, Ian M.** *Solvent Handbook Recovery*. Oxford : Blackwell Publishing Company, 2002.

16. Annex

Pel que fa a l'annex, s'indiquen els càlculs que es van anar fent per arribar als resultats que s'han plantejat com a definitius.

Composicions aliment, líquid i vapor

La primera fracció amb la que es va provar de treballar, va ésser la següent:

Tabla 27: Primera fracció d'aliment de treball en kmols

Compost	Teb (°C)	x_F
Aigua	100	0,4
Benzè	81	0,16
Toluè	110	0,08
Ciclohexà	80,1	0,11
Metanol	64,65	0,08
Etilenglicol	197,25	0,07
Fenol	181,85	0,1

A partir d'aquesta composició i amb el següent model matemàtic es va treballar per trobar les composicions de líquid i vapor.

$$F = L + V$$

$$F x_{FA} = L x_A + V y_A$$

$$F x_{FB} = L x_B + V y_B$$

$$F x_{FT} = L x_T + V y_T$$

$$F x_{FC} = L x_C + V y_C$$

$$F x_{FM} = L x_M + V y_M$$

$$F x_{FE} = L x_E + V y_E$$

$$F x_{FF} = L x_F + V y_F$$

$$P^0 x_A = P y_A$$

$$P^0 x_B = P y_B$$

$$P^0 x_T = P y_T$$

$$P^0 x_C = P y_C$$

$$P^0 x_M = P y_M$$

$$P^0 x_E = P y_E$$

$$P^0 x_F = P y_F$$

$$x_A + x_B + x_T + x_C + x_M + x_E + x_F = 1$$

On:

F: Cabal molar de l'aliment

L: Cabal molar del líquid

V: Cabal molar del vapor

x_{FX} : Fracció molar del component X en l'aliment

x_X : Fracció molar del component X en el líquid

y_X : Fracció molar del component X en el vapor

P^0 : Pressió de vapor de cada component

P: Pressió cambra d'operació

Per poder dur a terme aquest model, primer s'han de saber les pressions de vapor de cada component.

S'utilitzarà l'equació d'Antoine que diu així:

$$\ln P^0 = A + \frac{B}{T + C} + D \ln(T) + ET^F$$

Gràcies a la eina informàtica Aspen Hysys, es poden trobar aquests valors A, B, C, D, E i F que són constants.

Tabla 28: Constants de l'Equació d'Antoine

Compost	A	B	C	D	E	F
Aigua	65,9278	-7227,53	0	-7,17695	4,03E-06	2
Benzè	1,70E+02	-1,03E+04	0	-2,36E+01	2,09E-05	2,00E+00
Toluè	7,65E+01	-7,00E+03	0	-9,1635	6,23E-06	2,00E+00
Ciclohexà	7,10E+01	-6,19E+03	0	-8,46523	6,45E-06	2,00E+00
Metanol	5,98E+01	-6,28E+03	0	-6,37873	4,62E-06	2,00E+00
Etilenglicol	5,79E+01	-8,86E+03	0	-5,7166	3,11E-06	2,00E+00
Fenol	1,29E+02	-1,17E+04	0	-1,64E+01	7,85E-06	2,00E+00

Aquesta P vindrà donada en *KPa*.

La temperatura d'operació en aquest primer model serà de 110 °C, per utilitzar aquesta equació, ha de venir donada en K, per tant, 383 K. Aquesta temperatura es escollida així per ser aproximadament la temperatura mitjana dels compostos i a més perquè és una temperatura adient per la operació.

Amb això, ja es poden obtenir les pressions de vapor per a cada component.

Tabla 29: Pressions de vapor a 363 K

Compost	P ⁰ (kPa)
Aigua	142,525
Benzè	239,732
Toluè	99,0587
Ciclohexà	225,461
Metanol	477,856
Etilenglicol	3,52326
Fenol	8,55603

Per resoldre aquest problema, tindrem les següents variables:

- Composicions de vapor i líquid = 14 incògnites
- Cabal vapor i líquid = 2 incògnites

- Pressió de l'operació = 1 incògnita

Partirem de 16 equacions, així que es donarà una pressió al sistema per a poder treballar amb 16 equacions i 16 incògnites.

Per poder resoldre aquest model, s'utilitza la eina *Maple V*, que és un programa orientat a resoldre operacions matemàtiques i molt bàsic a l'hora d'utilitzar.

Primer es va assignar una pressió de 101,33 kPa al sistema i els resultats que es van obtenir van ser els següents:

Tabla 30: Composicions en kmols a pressió 101,33 kPa i 383 K

Compost	xf	x	y
Aigua	0,4	0,3166	0,4453
Benzè	0,16	0,0859	0,2008
Toluè	0,08	0,0812	0,0794
Ciclohexà	0,11	0,0613	0,1365
Metanol	0,08	0,0235	0,1107
Etilenglicol	0,07	0,1868	0,0065
Fenol	0,1	0,2457	0,0208

Obtenint un cabal molar en L de 35,23 kmol/h i un cabal molar V de 64,77 kmol/h.

El objectiu a l'inici d'aquest problema era fer passar un mínim de dos compostos únicament per un dels dos corrents per així tenir una separació efectiva i bona per passar a un següent estadi.

La següent prova va ésser baixant la pressió amb les mateixes composicions d'aliment per comprovar quina sèrie de canvis es produïen. Els resultats, amb una pressió de 50,665 kPa, van ésser els següents:

Tabla 31: Composicions en kmols a pressió 50,665 kPa i 383 K

Compost	x_f	x	y
Aigua	0,4	0,1553	0,4368
Benzè	0,16	0,0377	0,1784
Toluè	0,08	0,0437	0,0855
Ciclohexà	0,11	0,0275	0,1224
Metanol	0,08	0,0096	0,0906
Etilenglicol	0,07	0,3661	0,0254
Fenol	0,1	0,3601	0,0608

Obtenint un cabal molar en L de 13,08 kmol/h i un cabal molar V de 86,92 kmol/h.

En aquest últim cas, es comprova una alta separació entre els 2 components amb major punt d'ebullició però no suficient per el que es vol dur a terme.

Veient que variant la pressió, no s'aconseguiria la separació que es volia aconseguir, es va decidir que una de les opcions seria variar la temperatura d'operació.

Es va deixar la pressió a 101,33 kPa ja que és la pressió més fàcil a l'hora d'operar i fer canvis en la temperatura.

La primera temperatura d'operació a provar va ser de 373 K. Quan es varia la temperatura, varia la pressió de vapor, així que es van refer els càlculs de la pressió de vapor i van quedar de la següent manera.

Tabla 32: Pressió de vapor a 373 K

Compost	P^0 (kPa)
Aigua	100,786
Benzè	185,537
Toluè	73,8062
Ciclohexà	174,206
Metanol	351,906
Etilenglicol	2,15306
Fenol	5,49062

Amb aquestes condicions d'operació i utilitzant el mateix model matemàtic que en els casos anteriors, es van obtenir els següents resultats:

Tabla 33: Composicions en kmols a 373 K i 101,33 kPa

Compost	x_f	x	y
Aigua	0,4	0,4008	0,3986
Benzè	0,16	0,1239	0,2268
Toluè	0,08	0,0884	0,0644
Ciclohexà	0,11	0,0878	0,151
Metanol	0,08	0,0428	0,1488
Etilenglicol	0,07	0,1066	0,0023
Fenol	0,1	0,1497	0,0081

Obtenint un cabal molar en L de 64,92 kmol/h i un cabal molar V de 35,08 kmol/h.

Al realitzar aquest càlcul de composicions es pot veure una petita progressió en el que a eliminar components d'un corrent es refereix.

Es pot observar que el fenol i l'etilenglicol comencen a estar en proporcions petites. Es pot seguir treballant en aquesta direcció de baixar la temperatura.

Es va provar de baixar la temperatura en 10^0 més, és a dir, a 363 K, canviant les corresponents pressions de vapor. Al intentar fer el càlcul, en cap cas de les possibles solucions es van obtenir resultats coherents. S'havia portat l'operador flash més enllà del límit d'operació.

Sabent això, es va provar temperatures entre els 363 i els 373 K.

A la temperatura de 368 K i amb les següents pressions de vapor:

Tabla 34: Pressions de vapor a 368K

Compost	P^0 (kPa)
Aigua	84,0701
Benzè	162,110
Toluè	63,2594
Ciclohexà	152,201
Metanol	299,909
Etilenglicol	1,66489
Fenol	4,34727

S'obtenen les composicions següents:

Tabla 35: Composicions en kmols a 368 K i 101,33 kPa

Compost	x_f	x	y
Aigua	0,4	0,4058	0,3366
Benzè	0,16	0,1524	0,2438
Toluè	0,08	0,0826	0,0516
Ciclohexà	0,11	0,1056	0,1586
Metanol	0,08	0,0688	0,2035
Etilenglicol	0,07	0,0763	0,0012
Fenol	0,1	0,1087	0,0047

Obtenint un cabal molar en L de 91,66 kmol/h i un cabal molar V de 8,34 kmol/h.

En el que a les composicions es refereix, es torna a obtenir composicions més baixes en etilenglicol i fenol, però observant els resultats, es pot comprovar que en el que es refereix als cabals no s'obtenen bons resultats. El cabal de vapor és insignificant comparat amb el cabal de líquid i per tant torna a deixar un alt corrent de líquid sense cap tipus de separació apreciable per un segon tram del procés de recuperació d'aquests dissolvents.

Es pot comprovar que al baixar la temperatura d'operació, milloren les composicions en el que a eliminar compostos es refereix però per altra banda es veu una baixada del

cabal de vapor, factor que no ens interessa. A continuació, es van realitzar uns últims experiments baixant la temperatura per comprovar això afirmat anteriorment:

Es van provar càlculs a les temperatures de 364, 365 i 366 K i en totes elles temperatures no es van obtenir resultats coherents. Per últim, es va provar a la temperatura de 367 K.

Modificació de les pressions de vapor.

Tabla 36: Pressions vapor a 367 K

Compostos	P^0 (kPa)
Aigua	81,0205
Benzè	157,701
Toluè	61,3019
Ciclohexà	148,070
Metanol	290,302
Etilenglicol	1,58000
Fenol	4,14485

S'obtenen les composicions següents:

Tabla 37: Composicions en kmols a 367 K i 101,33 kPa

Compost	x_f	x	y
Aigua	0,4	0,4019	0,3213
Benzè	0,16	0,158	0,2458
Toluè	0,08	0,0807	0,0488
Ciclohexà	0,11	0,1088	0,159
Metanol	0,08	0,0767	0,2197
Etilenglicol	0,07	0,0716	0,0011
Fenol	0,1	0,1023	0,0042

Obtenint un cabal molar en L de 97,67 kmol/h i un cabal molar V de 2,33 kmol/h. Es comprova l'afirmació que s'havia fet anteriorment. El cabal de vapor baixa

proporcionalment amb la temperatura al igual que les composicions de l'etilenglicol i del fenol.

A continuació, es col·loca una taula comparant les baixades de temperatura respecte les composicions d'aquests dos components en la fase vapor i els cabals de vapor i líquid.

Tabla 38: Comparació. T en K i cabals en kmol/h

Temperatura	Vapor	Líquid	$y_{\text{Etilenglicol}}$	y_{Fenol}
383	64,77	35,23	0,0065	0,0208
373	35,08	64,92	0,0023	0,0081
368	8,34	91,66	0,0012	0,0047
367	2,33	97,67	0,011	0,0042

Veient que realitzant aquestes operacions (canviar pressió i/o canviar la temperatura) no s'obtenen els resultats positius en la realització d'aquest flash es planeja canviar l'estratègia de càlcul i la opció que es pensa més adequada és realitzar una suposició en la fracció molar del corrent vapor per comprovar quina fracció d'aliment s'hauria d'introduir per poder realitzar aquesta separació multicomponent i que sigui efectiva.

El model matemàtic a utilitzar seguirà essent el mateix, s'utilitzarà una temperatura de 373 K i una pressió de 101,33 kPa.

En el que es refereix a les dades de l'aliment, com ja s'ha comentat, es suposaran dades de fracció molar en la sortida del vapor. Les dades suposades són les següents:

Tabla 39: Suposició fraccions kmolars vapor

Compost	y
Aigua	0,3
Benzè	0,26
Toluè	0,005
Ciclohexà	0,19
Metanol	0,2448
Etilenglicol	0,0001
Fenol	0,0001

Per intentar tancar el càlcul el màxim possible, es suposen també les dades dels cabals molars de sortida. Essent el cabal del corrent líquid de 65 kmol/h i el cabal de corrent vapor 35 kmol/h.

Es realitzen aquests càlculs i s'arriba a les següents composicions de mescla:

Tabla 40: Composicions en kmols a 373 K i 101,33 kPa

Compost	xf	x	y
Aigua	0,4952	0,6	0,3
Benzè	0,1996	0,1671	0,26
Toluè	0,0071	0,0083	0,005
Ciclohexà	0,151	0,1301	0,19
Metanol	0,1413	0,0855	0,2448
Etilenglicol	0,0042	0,0065	0,0001
Fenol	0,0016	0,0025	0,0001

Després d'aconseguir trobar una fracció d'aliment en el qual s'aconsegueix gairebé eliminar dos compostos al corrent de vapor, es pot provar d'eliminar un tercer component per així aconseguir una mescla molt més simple.

Per intentar-ho, es provarà amb aquesta fracció d'aliment variant la pressió i/o la temperatura mantenint aquestes 2 fraccions de vapor als components etilenglicol i fenol.

S'han realitzat diferents proves a 101,33 kPa: a 383, 378, 375 i 363 K. Només s'han trobat resultats raonables en la temperatura de 363 K i són els següents:

Tabla 41: Composicions en kmols a 363 K i 101,33 kPa

Compost	xf	x	y
Aigua	0,4952	0,6152	0,4233
Benzè	0,1996	0,1604	0,2231
Toluè	0,0071	0,0100	0,0053
Ciclohexà	0,151	0,1267	0,1656
Metanol	0,1413	0,0727	0,1824
Etilenglicol	0,0042	0,0110	0,0001
Fenol	0,0016	0,0040	0,0001

Obtenint un cabal molar en L de 37,47 kmol/h i un cabal molar V de 62,53 kmol/h.

Es segueixen mantenint aquests dos compostos gairebé nuls al corrent de vapor i no s'ha aconseguit eliminar aquest tercer compost a la mescla.

Es van intentar proves a 50,665 kPa i no van ésser efectives. A les temperatures de 363, 373 i 383 K amb aquestes composicions d'aliment no es troben resultats coherents.

Amb aquest model matemàtic es van provar altres càlculs com suposar algunes fraccions de vapor de tres components per trobar la resta de fraccions de vapor i líquid i temperatura de treball però no van donar resultats coherents.

Fins a aquí, la mescla s'havia tractat com una mescla ideal, però, el que es vol tractar, és una mescla que surt de l'activitat industrial, per tant, es tractarà com una mescla real.

Per tractar-la com una mescla real, en comptes d'aplicar la llei de Raoult, s'haurà d'aplicar la llei de Raoult modificada que té la següent equació:

$$P_i = P_i^0 \cdot x_i \cdot \gamma$$

Es van tractar diferents coeficients d'activitat entre 0,6 i 0,9 i no es van obtenir resultats coherents.

Per tant, davant de totes aquestes complicacions es va decidir fer un canvi de mètode. Amb un model matemàtic semblant però amb algunes variacions en l'execució.

En aquest model s'han de trobar unes constants anomenades K_i que provenen de la relació entre la pressió del vapor de cada component i la pressió d'operació.

Posteriorment, com s'ha explicat a la introducció, s'haurà d'aplicar la següent equació per poder trobar el valor de q :

$$g(q) = \sum_{i=1}^c \frac{X_{0i}}{1 - q[1 - \frac{1}{K_i}]} - 1 = 0$$

Aquest valor de q serà el valor del cabal molar de L amb una base de càlcul d'1 kmol.

Haurem de substituir el valor de q i les composicions d'aliment i obtindrem les composicions de vapor

$$y_i = \frac{x_{0i}}{1 - q[1 - 1/K_i]}$$

I per últim, substituïrem les composicions de vapor en la següent equació per trobar les composicions al líquid.

$$y_i = K_i x_i$$

Primer, es va començant provant aquest model a una pressió de 101,33 kPa a diferents temperatures.

Començant per una temperatura de 373 K i aquesta no va convergir adequadament. Posteriorment, es van anar provant temperatures de 380, 390 i 400 K i cap d'elles va convergir. Es va baixar la temperatura a 360 K i aquesta, si que va convergir.

Primerament, es van obtenir els següents valors de K :

Tabla 42: Valors de K a 360 K

Compost	K
Aigua	0,6132
Benzè	1,7631
Toluè	0,5002
Ciclohexà	1,2164
Metanol	2,2035
Etilenglicol	0,1031
Fenol	0,0264

Amb aquests valors de K i les fraccions d'aliment ja esmenades abans:

Tabla 43: Composicions en kmols de l'aliment

Compost	xf
Aigua	0,4952
Benzè	0,1996
Toluè	0,0071
Ciclohexà	0,151
Metanol	0,1413
Etilenglicol	0,0042
Fenol	0,0016

S'obté un valor de q de 0,5265, que aplicat al nostre cabal d'aliment de 100 kmol/h, dóna un valor de 52,65 kmol/h de corrent líquid. Per tant, un corrent de vapor de 47,35 kmol/h.

Amb aquestes condicions es van obtenir les següents composicions de corrent de vapor i corrent líquid:

Tabla 44: Composicions en kmols a 360 K 101.33 kPa

Compost	x	y
Aigua	0,6062	0,3718
Benzè	0,1466	0,2585
Toluè	0,0093	0,0046
Ciclohexà	0,1370	0,1666
Metanol	0,0900	0,1983
Etilenglicol	0,0079	0,00008
Fenol	0,0030	0,00008

Al obtenir aquestes composicions de vapor i de líquid, s'ha comprovat que aquest model funciona, i per tant, que és apte per a seguir treballant, ara ja si, amb aquests components de forma real, aplicant els valors del coeficient d'activació.

Es va aplicar un coeficient d'activació global, és a dir, el mateix coeficient d'activació per a cada component de la mescla, un coeficient de 0,9 i es va obtenir una q de 0,8709, és a dir un cabal de corrent líquid de 87.09 kmol/hora. En quant a les composicions, es van obtenir les següents:

Tabla 45: Composicions en kmols a 360 K, 101,33 kPa i un Coeficient de 0.9

Compost	xf	x	y
Aigua	0,4952	0,5256	0,2901
Benzè	0,1996	0,1855	0,2944
Toluè	0,0071	0,0076	0,0034
Ciclohexà	0,151	0,1492	0,1633
Metanol	0,1413	0,1254	0,2487
Etilenglicol	0,0042	0,0048	0,00004
Fenol	0,0016	0,0018	0,00004

Com es pot comprovar, es segueixen tenint resultats molt semblants. En aquest moment de la operació, i veient tots els resultats obtinguts durant tots aquests càlculs i totes les

proves que s'han realitzat, podem afirmar que l'intent de treure un tercer component en el corrent vapor no ha estat complet.

En aquest últim càlcul de composicions, es pot observar un cabal molt petit, així que no serà factible treballar amb aquestes condicions d'operació.

Per últim, es va provar d'augmentar la temperatura fins a 90 °C, que són 363 K, mantenint la pressió i mantenint el coeficient d'activitat de 0,9 i es van obtenir els següents resultats. En el que a K es refereix:

Tabla 46: Valors de K a 363 K i 101,33 kPa

Compost	K
Aigua	0,6192
Benzè	1,7292
Toluè	0,4966
Ciclohexà	1,1928
Metanol	2,1945
Etilenglicol	0,0109
Fenol	0,0276

Es va obtenir una q de 0,5365, és a dir un corrent líquid de 53,65 kmol/h i un corrent de vapor de 46,35 kmol/h.

Es van obtenir les següents composicions:

Tabla 47: Composicions en kmols a 363 K, 101,33 kPa i un Coeficient d'activitat de 0,9

Compost	x_f	x	y
Aigua	0,4952	0,60133	0,37236
Benzè	0,1996	0,14918	0,25796
Toluè	0,0071	0,00926	0,0046
Ciclohexà	0,151	0,13861	0,16534
Metanol	0,1413	0,09095	0,19958
Etilenglicol	0,0042	0,00776	0,00008
Fenol	0,0016	0,00291	0,00008

Arribats a aquest punt, es tenen moltes composicions amb les que seguir treballant. Amb tots els càlculs s'han obtingut uns resultats de caire semblant en el que a composicions es refereix. Les temperatures de treball estan dins d'un interval adequat a la realitat. I finalment, totes les pressions de treball estan a 101,33 kPa, és a dir, 1 atm.



ANNEX 1.- AUTORIZACIÓ DE LA MATRÍCULA DEL TFG EN MODALITAT A o B

ESTUDIANT/A: Xavier Saez de Cortazar Gea Núm. Identificatiu 47989859Z
 GRAU EN: Enginyeria Química
 DIRECTOR/A DEL TFG: Anna Bonsfills Pedrós
 DEPARTAMENT: Enginyeria Minera i Recursos Minerals
 REALITZACIÓ EN ANGLÈS: Sí No
 MODALITAT: A B

TÍTOL: Valorització de dissolvents

DESCRIPCIÓ:
 L'objectiu principal és estudiar com es treballa actualment la recuperació de dissolvents i quines empreses hi treballen a Catalunya. Reconèixer quins són els dissolvents més difícils de tractar, buscar el perquè d'això i trobar una solució adient si és possible.

SOL·LICITUD PER A SER AVALUAT DE LES COMPETÈNCIES GENÈRIQUES EN NIVELL 3 (si no estan assolides)	Sí	No
1.- Emprenedoria i innovació		X
2.- Sostenibilitat i compromís social		X
3.- Tercera Llengua		X
4.- Comunicació eficaç oral i escrita		X
5.- Ús solvent dels recursos d'informació		X
6.- Aprenentatge autònom		X
7.- Treball en equip		X

Director/a

A. Bonsfills

Signatura

Co-director/a
(si s'escau)

Signatura

Estudiant/a

[Signature]

Signatura

Data Registre : 29/01/2015 (validesa: un any des de la data del registre)

3 Exemplars: Director/a / Secretaria de l'Escola / Estudiant/a per incorporar al TFG

* Normativa Transitòria fins que l'aplicatiu PRISMA permeti la gestió telemàtica del TFG
(Document aprovat per la Comissió Permanent de 5 de juliol de 2012, i per la Junta de Centre de 12 de juliol de 2012)



Escola Politècnica Superior
d'Enginyeria de Manresa

UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA

**NORMATIVA DEL TFG DE
L'EPSEM**

Emplenar per l'estudiant/a

ANNEX 2.- LLIURAMENT DEL TFG

ESTUDIANT/A: Xavier Saez de Cortazar Gea Núm. Identificatiu 47989859Z

GRAU EN: Enginyeria Química

DIRECTOR/A DEL TFG: Anna Bonsfills Pedrós

BREU RESUM DEL TFG (màxim 500 paraules):

VALORITZACIÓ DE DISSOLVENTS

En aquest projecte s'ha resolt una separació flash d'una mescla problemàtica per a la posterior recuperació de dissolvents. Aquesta mescla està composta per set components: aigua i sis dissolvents que són benzè, toluè, ciclohexà, metanol, etilenglicol i fenol. La raó d'utilitzar la destil·lació flash és per ser una tècnica econòmica.

S'ha dimensionat el separador flash, així com, s'han calculat els cabals de sortida i les seves composicions.

Per altra banda s'ha calculat el dimensionat d'un intercanviador de calor que escalfa l'aliment desde temperatura ambient fins a la temperatura d'operació.

S'ha treballat el primer estadi d'una tècnica que s'anomena evapo-oxidació i s'han presentat línies d'investigació futura per seguir treballant en aquest camp de la valorització de dissolvents

PARAULES CLAU (entre 2 i 5):

Dissolvent Flash Recuperació Valorització Destil·lació

AUTORITZO A PUBLICAR EL TREBALL A UPCommons: Sí No

Director/a

Co-director/a
(si s'escau)

Estudiant/a

A. Bonsfills

[Signature]

Signatura

Signatura

Signatura

Data lliurament : 10/07/2015

Lliurar a la secretaria: 1 còpia en paper de la memòria del TFG.

4 còpies en versió digital (CD o DVD) de la memòria del TFG

2 Exemplars: Secretaria de l'Escola / Estudiant/a

* Normativa Transitòria fins que l'aplicatiu PRISMA permeti la gestió telemàtica del TFG

(Document aprovat per la Comissió Permanent de 5 de juliol de 2012, i per la Junta de Centre de 12 de juliol de 2012)