SOFTWARE PARA LA EVALUACIÓN Y SIMULACIÓN DE LAS PLANTAS DE ÁCIDO NÍTRICO DE ABOCOL S.A

MAURICIO ANDRÉS HERAS VÉLEZ

HENRIQUE ALBERTO OLIVO BUSTILLO

MARICRISTY PIÑERES MESTRE

UNIVERSIDAD DE CARTAGENA

FACULTAD DE INGENIERÍA

PROGRAMA DE INGENIERÍA QUÍMICA

CARTAGENA DE INDIAS D.T Y C

2012

SOFTWARE PARA LA EVALUACIÓN Y SIMULACIÓN DE LAS PLANTAS DE ÁCIDO NÍTRICO DE ABOCOL S.A

MAURICIO ANDRÉS HERAS VELEZ
HENRIQUE ALBERTO OLIVO BUSTILLO
MARICRISTY PIÑERES MESTRE

Trabajo de grado presentado como requisito parcial para optar al título de Ingeniero Químico.

Director:
MIGUEL ÁNGEL MUESES
Ingeniero químico, M. Sc.

Asesor industrial:
ANTONIO HERAS
Ingeniero Químico

UNIVERSIDAD DE CARTAGENA

FACULTAD DE INGENIERÍA

PROGRAMA DE INGENIERÍA QUÍMICA

2012

Nota de aceptación

_____

_____

_____

_____

Presidente del Jurado

_____

Jurado

_____

Jurado

Cartagena de Indias D. T. y C., 3 de agosto de 2012

Señores:
COMITÉ DE INVESTIGACIÓN Y TRABAJOS DE GRADO
Programa de Ingeniería Química
Facultad de Ingeniería
Universidad de Cartagena

Cordial Saludo:

En mi calidad de director, presento a ustedes el siguiente informe final del trabajo de grado titulado "**Software para la evaluación y simulación de las plantas de ácido nítrico de ABOCOL S.A**", elaborado por los estudiantes **Mauricio Andrés Heras Vélez**, identificado con la cédula de ciudadanía 1.047.424.640, y código estudiantil 0230710021; **Henrique Alberto Olivo Bustillo**, identificado con la cédula de ciudadanía 1.047.409.640, y código estudiantil 0230710005; y **Maricristy Piñeres Mestre**, identificada con la cédula de ciudadanía 1.047435414 y código estudiantil 0230710011, pertenecientes al programa de Ingeniería Química.

Manifiesto mi participación en la orientación y mi conformidad con el resultado obtenido.

Atentamente,

_____

Ing. MIGUEL ANGEL MUESES, M.Sc.
Director del Trabajo de Grado
Profesor T.C. Programa Ingeniería Química
Universidad de Cartagena

Cartagena de Indias D. T. y C., 3 de agosto de 2012

Señores:
COMITÉ DE INVESTIGACIÓN Y TRABAJOS DE GRADO
Programa de Ingeniería Química
Facultad de Ingeniería
Universidad de Cartagena

Estimados Señores:

A continuación presentamos a su consideración el informe final del trabajo de grado titulado “Software para la evaluación y simulación de las plantas de ácido nítrico de ABOCOL S.A”, como requisito para obtener el título profesional otorgado por la Universidad de Cartagena en Ingeniería Química.

Agradecemos a ustedes la atención prestada a este trabajo.

Atentamente,

_____	_____
Mauricio Andrés Heras Vélez	Henrique Alberto Olivo Bustillo
Cód. 0230710021	Cód. 0230710005

_____
Maricristy Piñeres Mestre
Cód. 0230710011

DEDICATORIA

A Dios que me ha permitido alcanzar este logro, a mis padres que han sido una bendición en mi vida, a mi padre en especial que fue mi ángel de la guarda en este proyecto, a mi hermano, para quien espero poder ser un ejemplo, a toda mi familia, amigos y compañeros que de una u otra manera aportaron en mi crecimiento personal y profesional, y por ultimo para una persona que aunque no está conmigo sé que está orgulloso de este logro, Mi abueloToño.

Mauricio

A Dios, quien me dio la vida y me permite vivirla con felicidad. A mis padres, Enrique y María B., quienes me sirvieron de guía para ser quien soy hoy. A mi hermano, Carlos, y a mi novia Silvia, quienes han sido una grata compañía y apoyo en muchos años de mi vida.

Henrique

A Dios, a la Santísima Virgen María, por iluminarme y mostrarme el camino, por nunca permitir que desfallezca y ser la fortaleza para la lucha diaria.

A mis padres, Luis Alberto y Elsy, por brindarme su apoyo incondicional y esta gran oportunidad de superación. Y a Jesús Gómez, mi amigo, mi compañero, mi cómplice y mi amor, por ser acompañarme a superar todas las adversidades y alcanzar esta meta.

Maricristy

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos sinceramente a:

Al Ingeniero Miguel Ángel Mueses, nuestro docente, tutor y amigo por su asesoría, paciencia y dedicación en la ejecución de este proyecto.

A ABOCOL S.A., muy especialmente a Antonio Heras, jefe de turno en las plantas de ácido nítrico por su apoyo y colaboración.

Al Ingeniero Gustavo Mendoza, por toda su colaboración prestada, por su disponibilidad y ayuda, por ser un amigo y acompañarnos en este proyecto.

A la Universidad de Cartagena, el Programa de Ingeniería Química y su grupo docente por desarrollar en nosotros las competencias necesarias para la realización del presente proyecto.

Finalmente a nuestros compañeros quienes además de llegar a ser grandes amigos contribuyeron también a nuestro aprendizaje.

CONTENIDO

Pág.

RESUMEN **15**

ABSTRACT **16**

INTRODUCCIÓN **17**

1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA **18**

2. JUSTIFICACIÓN **19**

3. OBJETIVOS **20**

3. 1 OBJETIVO GENERAL: 20
3. 2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS: 20

4. MARCO DE REFERENCIA **21**

4. 1 ANTECEDENTES 21
4. 2 MARCO TEORICO Y CONCEPTUAL 22
4. 2. 1 Características generales de las materias primas. *23*
4.2.2 Descripción detallada del proceso *23*

5. METODOLOGÍA **28**

5.1 RECOLECCIÓN DE VARIABLES 28
5.1.1 Fuentes de Información Primaria *28*
5.1.2 Fuentes de Información Secundaria *29*
5.2 POBLACION Y MUESTRA 29
5.3 VARIABLES 29
5.3.1 Operacionalización de las variables *29*
5. 4 MODELO MATEMÁTICO INTERCAMBIADOR DE CALOR 32
5. 4. 1Parámetros para solucionar modelo matemático de intercambiador de calor *36*
5.5 MODELO MATEMÁTICO DE CALDERA DE VAPOR RESIDUAL 40
5. 5. 1Parámetros para solucionar modelo matemático de caldera de vapor residual *43*
5. 6 MODELO MATEMÁTICO ENFRIADOR 46
5.7 MODELO MATEMÁTICO REACTOR 49
5. 7. 1 Parámetros para solucionar modelo matemático de reactor *53*
5.8 MODELO MATEMÁTICO TORRES DE ABSORCIÓN 57
5. 8. 1 Parámetros para solucionar modelo matemático de torres de absorción *60*
5.9 MODELO MATEMÁTICO DE TURBINA 64
5. 5. 1Parámetros para solucionar modelo matemático de turbina *66*
5. 10 MODELO MATEMÁTICO COMPRESOR 68
5. 11 MODELO MATEMÁTICO PARA FILTROS 71

6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN **75**

7. CONCLUSIONES **85**

8. RECOMENDACIONES..... 89

9. REFERENCIAS 90

ANEXOS 92

LISTA DE TABLAS

Página

Tabla 1.Variables independientes……..……...…….……27

Tabla 2. Variables Dependientes……..……..…..…….….28

Tabla 3. Variable Interviniente……..……...…….….28

Tabla 4. Lista de equipos a modelar ……..……...……..….28

Tabla 5. Características físicas de los intercambiadores…….……..…….....…... 29

Tabla 6. Modelo matemático intercambiador tubo y coraza……...……...…....….33

Tabla 7. Resumen ecuaciones modelo matemático intercambiador tubo y coraza …….. 36

Tabla 8. Características físicas de las calderas de vapor residual…….....…..37

Tabla 9. Modelo matemático caldera de vapor residual……..…….....39

Tabla 10. Resumen ecuacione modelo matemático Caldera de vapor residual……42

Tabla 11.Características físicas de los enfriadores…….……...……43

Tabla 12. Modelo matemático enfriador…….....44

Tabla 13. Resumen ecuaciones modelo matemático cooler-condenser …….. ……..45

Tabla 14. Características físicas reactores …….……...……..46

Tabla 15. Modelo matemático reactor ……..……..50

Tabla 16. Resumen ecuaciones modelo matemático reactor ……..……....51

Tabla 17. Características físicas torres de absorción…….……..……...…52

Tabla 18. Modelo matemático torres de absorción……..……..……..…..55

Tabla 19. Resumen ecuaciones modelo matemático Torre de Absorción……..58

Tablas20. Características físicas de las turbinas de las plantas de acido nítrico de ABOCOL S.A. ……61

Tabla 21. Modelo matemático Turbinas……..……62

Tabla 22. Resumen ecuaciones modelo matemático Turbinas……64

Tabla 23. Características físicas de los compresores de las plantas de acido nítrico de ABOCOL S.A. ……65

Tabla 24. Modelo matemático compresores……....67

Tabla 25. Resumen ecuaciones modelo matemático compresores……..67

Tabla 26. Características físicas de los filtros de las plantas de acido nítrico de ABOCOL S.A. ……..68

Tabla 27. Modelo matemático Filtros……...70

Tabla 28. Resumen ecuaciones modelo matemático filtros……...71

Tabla 29. Datos del balance de materia de los filtros en las plantas de producción de ácido nítrico de ABOCOL S.A. ……84

LISTA DE FIGURAS

Página

Figura 1. Diagrama de Flujo de la planta de ácido nítrico NAN1……..…25

Figura 2. a) Esquema Intercambiador de calor tubos y coraza. b) Diagrama de flujo de intercambiador de calor con volumen de control…….……...30

Figura 3. Algoritmo modelo matemático de un intercambiador de calor…..….30

Figura 4. Esquema de caldera de vapor residual……..……...37

Figura 5. Algoritmo modelo matemático de caldera de calor residual……..38

Figura 6. Esquema cooler condenser……...…….....43

Figura 7. Algoritmo para obtener modelo matemático de Reactor…….45

Figura 8. a) Esquema reactor. b) Volumen de control para un reactor de lecho……..…….46

Figura 9. a) Esquema torres de absorción con corrientes de entrada y salida. b) Diagrama de flujo de gas de proceso en torres de absorción. ……..53

Figura 10. Algoritmo para obtener modelo matemático de Torres de absorción.53

Figura 11. Esquema de Turbina…….....61

Figura 12. Algoritmo para llevar a cabo simulación de turbina.....62

Figura 13. Distribución de Cp en función de λ yβ.....63

Figura 14. a) Esquema de un compresor. b) Diagrama de flujo de materia y energía en compresor.....64

Figura 15. Algoritmo para llevar a cabo la simulación del compresor.....65

Figura 16. a) Esquema filtro gas-sólido. b) Diagrama de flujo del filtro para el balance.....68

Figura 17. Algoritmo para llevar a cabo la simulación de un filtro.....68

Figura 18. Intercambiadores de calor a) E-802, b) E-815, c) NAN-1, d) ME-0150.....70

Figura 19. Gráfica de validación para modelo matemático (Intercambiadores de calor NAN-1, NAN-2, NAN-3)……..…….……..71

Figura 20. Calderas a) WHB-102A (NAN-1), b) WHB-102B (NAN-1), c) B-801 (NAN-2), d) ME-0163 (NAN-3), e) ME-0152 (NAN-3)……...…73

Figura 21. Gráfica de validación para modelo matemático (Calderas de vapor residual NAN-1, NAN-2, NAN-3)……..……....74

Figura 22. Enfriadores a) E-801, b) NAN-1, c) E-1601…….....74

Figura 23. Gráfica de validación para modelo matemático (Enfriador NAN-1, NAN-2, NAN-3)……..……..…..……...75

Figura 24. a) Gráfico Temperatura vs peso del catalizador NAN1. b) Gráfico Temperatura vs peso del catalizador NAN2. c) Gráfico Temperatura vs peso del catalizador NAN3..……....76

Figura 25. Gráfica de validación para modelo matemático (Reactor NAN-1, NAN-2, NAN-3) a) Temperatura (°F) b) Flujo(lb/h)…….……..77

Figura 26. a) HNO_3 producido por plato (NAN-1). b) Temperatura en cada plato (NAN-1). c) HNO_3 producido por plato (NAN-2). d) Temperatura en cada plato (NAN-2). e) HNO_3 producido por plato (NAN-3). f) Temperatura en cada plato (NAN-3)……...78

Figura 27. Gráfica de validación para modelo matemático (Torres de absorción NAN-1, NAN-2, NAN-3).....79

Figura 28. Gráfica de validación para modelo matemático de compresor y turbina……83

Figura 29. Gráfica de validación para modelo matemático (Filtros).....81

LISTA DE ANEXOS

Anexo A. Diagrama de flujo de proceso de NAN1, NAN2, NAN3..... 90

Anexo B. Procedmiento de determinación de modelos matematicos..... 93

Anexo C. Tablas para calculos..... 103

Anexo D. Herramientas matematicas utilizada..... 107

Anexo E. Memorias de Cálculo 108

Anexo F. Manual del usurario "Software HNO3.UdC-*A* Simulator V1.0.……..167

RESUMEN

El presente proyecto de grado está enfocado en la creación de un software para la evaluación y simulación de las plantas de ácido nítrico en ABOCOL S.A., ya que dicha empresa no cuenta con una herramienta que permita su evaluación rápida, eficiente y de fácil acceso. Se hace una descripción detallada del proceso de obtención de ácido nítrico utilizado.

Las plantas de ácido nítrico, en ABOCOL S.A., siguen el mismo proceso general, empezando con un precalentamiento de la carga, siguiendo con la oxidación a monóxido de nitrógeno (NO). Posteriormente se forma Dióxido de Nitrógeno (NO_2) y se culmina con la absorción y formación de ácido nítrico.

La metodología empleada para la modelación, evaluación y simulación de las plantas de acido nítrico de ABOCOL S.A. permite establecer las variables más relevantes del proceso, tales como, temperatura, presión, masa de catalizador, entre otras, además de saber cómo estas influyen en el proceso, con el fin de modelar de manera más aproximada, para que el programa creado arroje de manera veraz los resultados.

Se desarrollan estructuras matemáticas, que describen el comportamiento de los equipos más relevantes, que afectan el proceso de producción, y se solucionan a partir de métodos numéricos. Los valores de R^2 (coeficiente de determinación) oscilaron entre 0.94 y 0.99, muy similares a los de la literatura para procesos similares. Por lo tanto quedan validados los modelos basados en este dato. Los comportamientos observados en la solución de los modelos son similares a los presentados en la realidad, como por ejemplo los equipos de transferencia de calor, los reactores, las torres, turbinas, compresores y filtros.

Luego de realizar los modelos, se desarrolló la simulación en el ambiente de programación *visual basic*, permitiendo evaluar las plantas, y validando el software con los datos experimentales suministrados por ABOCOL S.A. Se obtuvo una herramienta computacional, desarrollada en *visual basic*, basada en las condiciones de operación de las plantas de ácido nítrico y los modelos matemáticos de los equipos.

ABSTRACT

This project is focused to the creation of software for evaluation and simulation of nitric acid plants in ABOCOL SA, since that company does not have a quick, efficient and easy accessible evaluation tool. It describes the process of obtention of nitric acid.

Nitric acid plants, in ABOCOL S.A., follow the same general process, starting with a preheating of the burden, followed by oxidation to Nitrogen Monoxyde (NO). The Nitric Dioxyde, NO_2, is formed and then culminates with the absorption and formation of nitric acid.

The methodology used for modeling, evaluation and simulation of nitric acid plants ABOCOL S.A. let us identify the most relevant process variables such as temperature, pressure, mass of catalyst, among others, as well as how these influence the process in order to model more approximate to dispose of the program created truthfully the results.

The development of the mathematical structures, that describes the behavior of the more transcendental, that affect the production process, and give a solution through numerics methods. R^2 values (coefficient of determination) ranged between 0.94 and 0.99, very similar to those in the literature for similiares processes. Therefore models are validated based on this data. The behavior observed in the solution of the models are similar to those presented in reality, such as heat transfer equipment, reactors, towers, turbines, compressors and filters.

After making the models, the simulation was developed in Visual Basic programming environment, allowing evaluate the plants, and validated by experimental data provided by ABOCOL S.A. We obtained a computational tool developed in Visual Basic, based on the operating conditions of the nitric acid plants and the mathematical model of the equipments.

INTRODUCCIÓN

El proceso de globalización de la economía, ha influenciado en el desarrollo de países con una fuerte dependencia del sector agrícola, lo cual implica la mejora continua de los tiempos de siembra, número de cosecha y calidad del producto sembrado. Perteneciendo Colombia a este grupo de países, y acogiéndose a las exigencias del mercado mundial, los agricultores nacionales se han visto obligados a tecnificar los procesos de regeneración de nutrientes, en los suelos usados para cultivar. Dentro de las ofertas existentes a nivel nacional, ABOCOL S.A, es una de las empresas que apuntan a la generación de soluciones de dicha demanda, siendo uno de los proveedores de fertilizantes más importantes del país.

Para la producción de fertilizantes, ABOCOL S.A, utiliza como materia prima fundamental el ácido nítrico, producido en las instalaciones de la empresa. La mejora periódica de las condiciones del proceso de obtención de ácido nítrico, se reflejará en la disminución de los costos de producción y el aumento en la rentabilidad de los fertilizantes.

Este trabajo de grado, está dirigido al desarrollo de un software que permita la evaluación y simulación de las tres plantas de acido nítrico (NAN-1, NAN-2, NAN-3) que se encuentran en ABOCOL S.A, usando la plataforma de VISUAL BASIC. Es importante la creación de este software por varios aspectos, entre los cuales se destacan la optimización del manejo del tiempo, ya que, al tener las condiciones normales de operación de la planta, los operadores, sólo deben observar la solución planteada en el programa. La implementación de un software que no requiere licencia para su uso, en este caso Visual Basic, es económicamente ventajoso para la empresa en donde se trabajará, y por último, el aspecto ingenieril proporcionará los mecanismos para la toma de decisiones y evaluación de la planta.

Con la creación de esta herramienta computacional y sus respectivos algoritmos se busca, favorecer la evaluación de las condiciones de las plantas, de manera eficiente y eficaz. Así mismo, esto conlleva a un manejo adecuado de la información, lo cual permite una fácil comprensión y utilización de la herramienta a crear.

1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

En la obtención de ácido nítrico en las plantas de ABOCOL S.A. se lleva a cabo un previo acondicionamiento de las materias primas para realizar la oxidación catalítica y la absorción como base en el proceso de producción, y por último, antes de la disposición final, se realiza un blanqueo.

En la actualidad, ABOCOL S.A. cuenta con tres plantas de producción de ácido nítrico, las cuales deben ser evaluadas una vez por semana, esto implica 144 evaluaciones por año. Con un duración promedio de 3 horas por evaluación, el tiempo empleado es aproximadamente de un día a la semana; el cual, es el requerido por un ingeniero dedicado a esta actividad. De manera adicional, el método de consulta actual de las evaluaciones anteriores es bastante limitado dado que no existe una base de datos formal de las condiciones de proceso.

La creación de este proyecto surge para suplir las necesidades de evaluación de las plantas de ácido nítrico en ABOCOL S.A. tales como; mejoramiento del tiempo utilizado en la estimación de las variables de proceso en la planta y facilidad en la toma de decisiones. El tiempo se convierte en un factor trascendental, para la mejora de las actividades realizadas, que conllevan a la búsqueda de mecanismos para incrementar y gestionar la calidad en las plantas.

Son estas las razones generadoras en ABOCOL S.A. del requerimiento del desarrollo de herramientas, de propiedad intelectual de la compañía, que no produzcan gastos referidos a licencias de software. Asimismo, existe la dificultad en el manejo de mecanismos tecnológicos permitiendo llevar a cabo la valoración y optimización de las plantas.

2. JUSTIFICACIÓN

Ante la necesidad de reducir los tiempos de generación de informes, consultas de bases de datos y la estandarización de los métodos de análisis, ABOCOL S.A. requiere el diseño e implementación de una herramienta computacional, que permita la simulación y evaluación de las plantas de ácido nítrico. De esta manera se crean informes de manera mucho más eficaz y eficiente de las actividades, arrojando soluciones puntuales y óptimas para cualquier inconveniente presentado en el campo a trabajar.

Es importante la realización del proyecto debido a que ABOCOL S.A se ha visto en la necesidad de manejar un software propio, por tanto, esto conlleva a un ahorro en los períodos de visitas directas a las plantas y la toma de datos en estas; la inversión económica disminuiría debido al recorte de las visitas de operarios, por consiguiente, podrían dedicarse a otras actividades, y el lenguaje a utilizar sería práctico y entendible para los ingenieros y operarios de dicha planta.

Paralelo a esto, no existe una herramienta la cual posibilite una evaluación de forma integral del estado de la planta y cada una de las etapas, por tanto la optimización del proceso puede llegar a verse un poco limitada. Adicionalmente, la creación de este software, surge como una alternativa para permitir el mejoramiento del proceso de producción de ácido nítrico en las tres plantas de ABOCOL S.A.

3. OBJETIVOS

3. 1 Objetivo General:

- Diseñar una herramienta computacional que permita evaluar y simular los procesos de producción de ácido nítrico de las plantas de ABOCOL S.A, usando la plataforma de Visual Basic.

3. 2 Objetivos Específicos:

- Identificar las variables más relevantes en las condiciones del proceso, con el fin de delimitar las aproximaciones matemáticas y los alcances de la simulación.
- Construir una estructura matemática que permita evaluar la condición real de operación de una planta de producción de ácido Nítrico.
- Desarrollar un software de simulación basado en la solución de los modelos matemáticos en la plataforma Visual Basic que permita evaluar y simular los procesos producción de ácido nítrico utilizado en ABOCOL S.A.
- Validar, el software desarrollado en Visual Basic utilizando los datos reales del proceso de producción de ácido nítrico suministrado por ABOCOL S.A.

4. MARCO DE REFERENCIA

4. 1 ANTECEDENTES

El ácido nítrico es un compuesto, usado principalmente como materia prima para la producción de fertilizantes NPK (Nitrógeno, fósforo, Potasio); agente nitrante en la fábrica de explosivos; en el proceso de pasivación, y como comprobador de platino y oro. Las principales características de este ácido son tres, es un fuerte agente oxidante, es un ácido fuerte y sirve como fuente de nitrógeno fijo [1].

Los primeros registros del uso de ácido nítrico y nitratos se ubican en la época de la alquimia, pero las fechas exactas no se encuentran debido a que en esta época la práctica de la química de esta se consideraban como brujería, y por lo tanto era castigado con la muerte. Al principio del siglo XIII, los chinos fueron los primeros en usar nitratos y fabricar cohetes con pólvora, mientras los árabes fueron los primeros en usar armas fabricadas con pólvora. Estos últimos fueron los primeros en producir y comercializar el nitrato. [2]

El ácido nítrico como tal, se fabricó por medio de un sulfato doble como materia prima, el cual estaba constituido por dos sulfatos, uno monovalente y uno trivalente, los cuales formaban el alumbre, nombre de la materia prima. También se uso el vitrol, de igual forma era un sulfato doble, pero la diferencia con el alumbre era que este necesariamente, no era de sulfatos mono y trivalente.

La evolución de la producción de ácido nítrico se dio de la siguiente manera: Primero se utilizó el arco eléctrico; se basa en la inducción de electricidad de manera directa al aire, para formar NO_2, para luego diluirlo en una solución de HNO_3, en donde el agua de esta solución formaría más ácido; luego el arco, que inicialmente era de hierro, se sustituyó por uno de platino (realizado por Kulman en 1838) [3], el cual catalizaba mejor la reacción; seguido de esto, hubo nuevas ideas, entre las cuáles se denotó la formula empírica del ácido nítrico, y su uso como fertilizante.

Por último Otswald y Brauer le dieron el toque ingenieril a el proceso de producción, observando distintas relaciones de presión, temperatura, catalizador e hicieron el montaje como tal de la planta, que posteriormente fue optimizado por Kaiser, en 1909[4].

La producción y comercialización de amoniaco en forma sintética la realizaron Fritz Haber y su compañero Bosch, por lo cual ganaron un premio nobel. [5]

Basados en las investigaciones precedentes, específicamente el proyecto de modelación, simulación y optimización del proceso de ácido nítrico a monopresión, desarrollado en el instituto de tecnología química de la Universidad de Mumbai[6], India, se observa que este trabajo puede soportar las descripciones realizadas en este proyecto, en cuanto se refiere al modelamiento y el proceso de validación que es realizado.

Sin embargo, en la investigación se desarrollan ciertos aspectos como el diseño del proceso, la eficiencia energética, tasas de transferencia, etc., con los cuales ya se cuenta en el proyecto a desarrollar, por lo tanto no es un objetivo a alcanzar y limita la información suministrada, ya que la investigación de la información descrita, se enfoca y da mayor relevancia a estos aspectos.

4. 2 MARCO TEORICO Y CONCEPTUAL

El método con el cual se realizará la oxidación catalítica del amoniaco, se presenta de manera general, en 3 etapas:

- El primer paso es la oxidación catalítica del amoniaco a óxido nítrico en presencia de un catalizador.
- La segunda etapa consiste en la producción de dióxido de nitrógeno por oxidación, con el oxígeno del aire, del óxido nítrico obtenido en la etapa anterior.
- La tercera fase del proceso consiste en la disolución del dióxido de nitrógeno en agua para obtener una solución diluida del ácido.

Al profundizar en las bases y funcionamiento del procedimiento a estudiar, se analiza que no son sólo tres etapas básicas del método, sino que estas abarcan varias subetapas adicionales, las cuales son fundamentales para llevar a cabo la obtención del ácido nítrico y así alcanzar las condiciones deseadas para el funcionamiento eficiente y eficaz de las plantas.

4. 2. 1 Características generales de las materias primas.

Como elementos primordiales, se tienen las siguientes materias primas:

1. **Amoniaco**: El Amoniaco puro tiene una concentración máxima de 99.5% en peso, el cual posee un contenido de aceite que no debe superar 5 ppm; este debe estar libre de Plomo, Hierro, Silicio, Arsénico, Fósforo y otros elementos, porque contaminan la gasa donde se encuentra el catalizador y bajan la eficiencia de la conversión.
2. **Aire Comprimido**: El aire comprimido debe estar a presiones entre 100 y 125 psig, con el mínimo contenido de aceite. La compresión es realizada por un compresor centrífugo, que entrega aire a una temperatura de 364 °F. Un descenso en la presión de aire resulta en una baja del flujo de este y un aumento en la relación amoniaco/aire en el convertidor, por lo tanto debe mantenerse la presión del proceso.
3. **Catalizador de platino-rodio**: La gasa a emplear debe ser de 0.003 pulgadas de diámetro de hilo, con aleación platino-rodio 90-10, y el peso a montar debe estar entre 250 y 300 lb NH_3/onza troy-día.
4. **Agua de alimento a la torre de absorción**: Es el agua empleada para absorber el NO_2 en la absorbedora para producir el HNO_3. Debe ser teóricamente pura y el nivel de cloruros debe estar por debajo de 1 ppm.
5. **Agua de enfriamiento**: Es agua cruda de la poza de almacenamiento, sometida a una filtración en filtros de arena antracita, antes de entrar a la torre de enfriamiento.
6. **Catalizador del abatidor**: Está compuesto por 76% dióxido de titanio, 1% pentóxido de vanadio, 1% trióxido de tungsteno y 22% soporte.

4.2.2 Descripción detallada del proceso

El proceso de transformación del amoniaco a ácido nítrico está dividido en dos secciones: (a) oxidación del amoniaco y (b) la oxidación y absorción de los óxidos de nitrógeno. La figura 1 muestra el PFD del proceso.

Aire y amoniaco son premezclados y entonces pasados a través de una gasa de platino-rodio en el convertidor donde las siguientes reacciones ocurren:

1) $4\ NH_3 + 5\ O_2 \longrightarrow 4\ NO + 6\ H_2O + 216.600$ calorías

2) $4\ NH_3 + 3\ O_2 \longrightarrow 2\ N_2 + 6\ H_2O + 302.700$ calorías

3) $4\ NH_3 + 6\ NO \longrightarrow 5\ N_2 + 6\ H_2O + 431.900$ calorías

La primera reacción es la deseada en la producción del ácido nítrico y es la que más se da a alta temperatura (1.700 °F) con un flujo rápido a través de la gasa catalizadora de platino. A temperaturas de gasa por encima de 1787 °F y bajo suministro de oxígeno, la segunda reacción se favorece. Cuando la conversión es incompleta (demasiada velocidad) la reacción (3) toma lugar.

El NO y otros gases calientes pasan a través de un recalentador de gases de cola y un calentador de aire donde ellos son enfriados a 1200 °F antes de entrar a la caldera de recuperación de calor residual. En el recalentador, el gas de cola proveniente de la torre de absorción (el cual ha pasado por un separador de niebla, atemperador y precalentador) es calentado de 364 °F a 1050 – 1100 °F. El calentador de aire es empleado para calentar el aire comprimido de 345 – 364 °F hasta 570 – 584 °F, antes de su entrada al mezclador de gases, en donde se mezclara con el amoniaco gaseoso.

El flujo de gas de proceso en la caldera sirve para generar vapor saturado a 275 psig y para enfriar los gases de proceso a 470 °F, causando alguna oxidación del NO a NO_2 y por lo tanto liberando más calor (reacción 4). El gas enfriado se pasa por un filtro de platino para recuperar las partículas de catalizador, las cuales han sido arrastradas con el flujo desde el convertidor. Antes de que el gas de proceso llegue al condensador, este último es enfriado a 385 °F por transferencia de calor con los gases de cola en el precalentador de gases de cola.

A partir de este punto, la formación de ácido nítrico se inicia en dos etapas como se muestra en las siguientes ocasiones:

4) $2\ NO + O_2 \longrightarrow 2\ NO_2 + 27.100$ calorías

5) $3\ NO_2 + H_2O \longrightarrow 2\ HNO_3 + 32.200$ calorías

Las mejores condiciones para la oxidación del óxido nítrico son la baja temperatura y la alta presión en exceso de oxígeno.

La oxidación del NO y la formación de ácido débil ocurren en el condensador. En este momento es muy importante que los gases se enfríen por debajo de 120 °F para promover la formación de NO_2. El ácido débil y los gases no condensados son separados en un separador de ácido, el ácido débil es bombeado a la columna de absorción y el gas de proceso es introducido al fondo de la columna para ser absorbidos en agua y formar ácido nítrico al 56% [7].

Cuando el gas de proceso entra a la columna de absorción a 116 °F, aire adicional es agregado al fondo de la torre de absorción a temperaturas entre 230 y 250°F

(denominado aire de blanqueo), aclarando el ácido producto por remoción de óxidos disueltos y además agrega oxígeno para oxidar el NO formado debido a la reacción No 5 en la torre de absorción. En condiciones óptimas, el contenido de oxígeno en el gas de cola debe ser de mínimo 2%. La reacción de absorción de NO_2 en agua es exotérmica y es favorecida por la baja temperatura.

El gas de proceso pasa en contracorriente al agua desmineralizada alimentada en el tope de la torre de absorción. Estos, gas y agua entran en contacto en cada uno de los 35 platos de absorción generando como resultado ácido nítrico. El calor de reacción es removido en cada plato por serpentines utilizando agua para el enfriamiento. [6] El ácido nítrico de color amarillo y concentrado al 56% sale de la torre por el fondo y es enviado al tope de la torre de blanqueo en donde entra en contacto con el aire, perdiendo su coloración característica. Del fondo de la torre de blanqueo el ácido fluye al tanque de almacenamiento por presión neumática.

Es importante que la presión en el sistema se mantenga, pues un aumento en la misma, de la torre de 10 psig equivale a 1% de incremento en la presión y por cada psig que baje la presión del sistema, se incrementa alrededor de 2 KWH/TM el consumo energético.

Aproximadamente, la rata de absorción varía con el cuadrado de la presión absoluta en atmósferas, hasta 120 – 130 psig.

Los gases del tope de la torre de absorción fluyen al separador de rocío donde se le elimina el líquido arrastrado. El gas entonces, pasa a través de un atemperador, precalentador y recalentador, causando un incremento de su temperatura de 105 °F hasta 1050°F -1100 °F.

La energía calórica del gas de cola, tomada del proceso a medida que se calienta, es recuperada en la turbina (conectado al compresor) como energía mecánica antes de ser enviado al sistema de abatimiento y recuperación de calor para el sistema de vapor.

El trabajo realizado por la turbina disminuye los requerimientos energéticos del compresor y por ende el consumo de vapor de la turbina Terry. Durante el arranque de la planta el consumo de vapor puede llegar a ser de 34.000 lb/hr, los cuales se deben importar de la planta de servicios industriales hasta cuando la caldera de recuperación de calor inicie la generación de vapor, y en operación normal cuando la turbina está trabajando el consumo de vapor a la turbina baja hasta 16.568 lb/hr. El generador de vapor inicia su trabajo al estar los gases a 600°F, y es cuando se permite flujo hacia este.

Antes de este proceso, los gases de cola son enviados a la atmósfera por la chimenea de la válvula stack. Mientas la presión y temperatura de los gases de cola aumentan, el trabajo realizado por el generador aumenta.

En la chimenea el gas de cola se encuentra con tres equipos. Estos son el Recalentador de vapor de exportación, el Economizador y el Abatidor.

El vapor generado en la planta que no se consume internamente, es exportado hacia la planta de amoniaco y de NPK. Este vapor se sobrecalienta 16°F para soportar las pérdidas de calor en la tubería de conducción hasta sus consumidores finales. El vapor se calienta con los gases de proceso salientes de la turbina.

Los gases de cola que salen del sobrecalentador ya mezclados con amoniaco entran al abatidor. El abatidor contiene un catalizador, en forma de celdas hexagonales adjuntas, el cual transforma los gases nitrosos a nitrógeno elemental mediante una reacción con amoniaco gaseoso.

En la superficie del catalizador VNX Nox ocurre la siguiente reacción:

6) $4\ NO + 4\ NH_3 + O_2 \longrightarrow 4\ N_2 + 6\ H_2O$

7) $2\ NO_2 + 4\ NH_3 + O_2 \longrightarrow 3\ N_2 + 6\ H_2O$

El gas se calienta 2.16°F por cada 100 ppm de Nox reducido, aproximadamente.

El catalizador está compuesto por una base cerámica sobre el cual se rocía una pintura a base de dióxido de titanio, pentóxido de vanadio y trióxido de tungsteno.

El último equipo en la chimenea es el economizador. En este el agua de alimento a calderas se calienta antes de entrar a la caldera de recuperación de calor para aumentar la eficiencia de la generación de vapor. El agua de alimento a calderas entra a 229°F y sale a 406°F [8].

Este procedimiento se realiza en todas la plantas de acido nítrico de ABOCOL S.A. (NAN-1, NAN-2, NAN-3) de la misma manera, variando solo la alimentación de las materias primas, debido a que la capacidad de producción de cada una de las plantas es diferente.

4.2.3 Diagrama de flujo del proceso

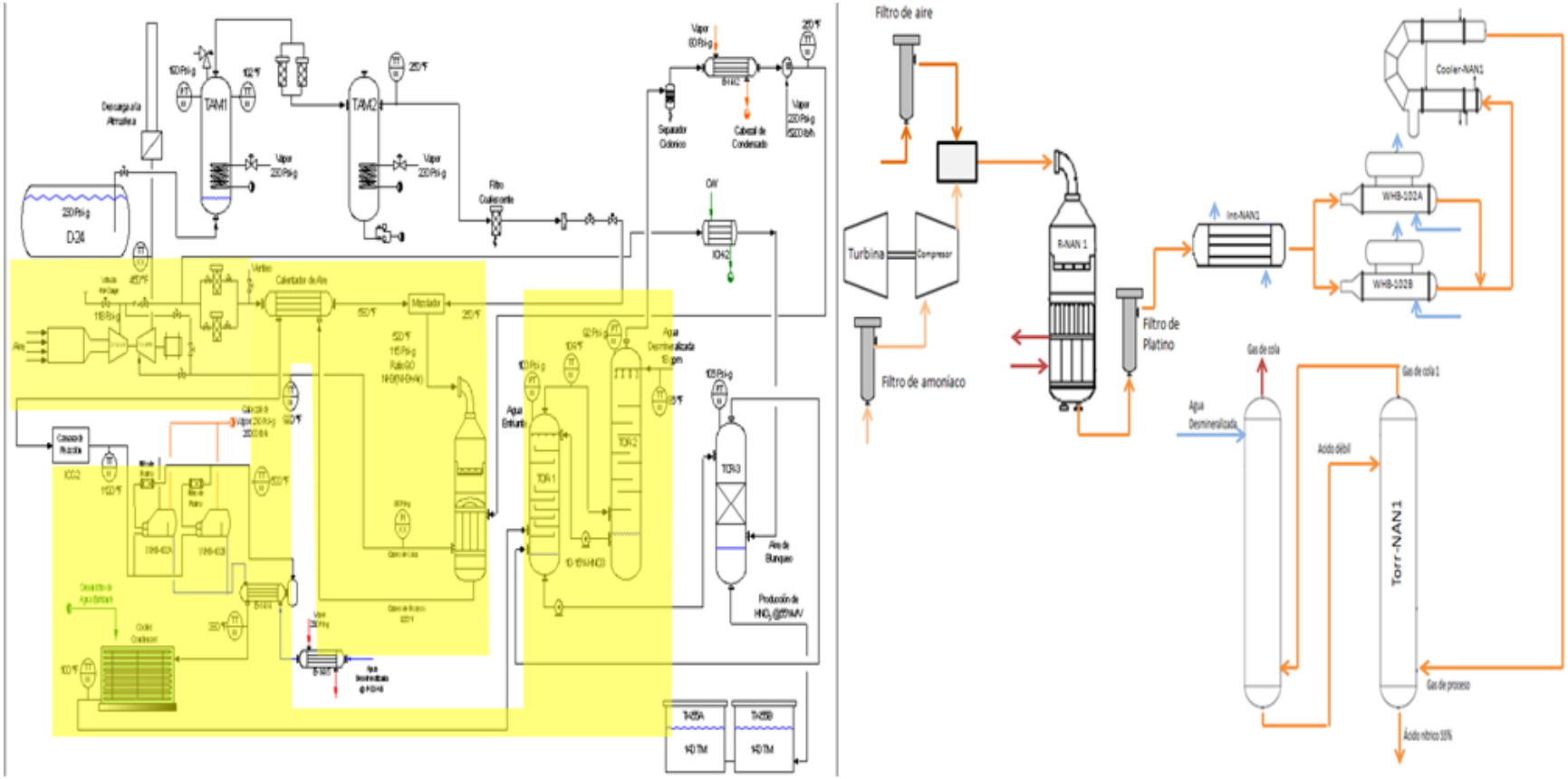


Figura 1. Diagrama de Flujo de la planta de ácido nítrico. Planta Norte. ABOCOL S.A

5. METODOLOGÍA

Este proyecto se lleva a cabo, como una investigación de tipo aplicativo, donde se realiza el análisis e interpretación del proceso de obtención de ácido nítrico en ABOCOL S.A., ubicada en la zona industrial Mamonal de Cartagena. El enfoque es la creación de una herramienta computacional que permita evaluar y simular los procesos de producción de ácido nítrico de las plantas (Norte Ácido Nítrico) NAN1, NAN2 Y NAN3 de ABOCOL S.A. en estado estable, usando la plataforma de Visual Basic. Para el desarrollo de este software, ***es necesario modelar matemáticamente los equipos que afectan directamente la línea de proceso***, esto se lleva a cabo mediante la identificación de variables y condiciones de operación del proceso, y basándose en información suministrada en manuales de operación de las plantas de acido nítrico y bibliografía consultada.

Los datos experimentales fueron obtenidos directamente de las plantas mediante los distintos medidores de temperatura, presión, flujo y concentración, bajo la supervisión de operadores e ingenieros de la empresa. Los diferentes instrumentos utilizados para la recolección de datos fueron termopares, manómetros, platinas de orificio y análisis cromatográficos.

Al disminuir la absorción de NO2 en el agua, se genera mayor cantidad de NOx, lo que representa no solo pérdidas económicas para ABOCOL S.A. sino también problemas legales y daños al medio ambiente. Por tanto las plantas de acido nítrico de ABOCOL S.A. mantienen sujeta su producción a la cantidad máxima permitida de NOx producidos.

5.1 RECOLECCIÓN DE VARIABLES

5.1.1 Fuentes de Información Primaria

Las fuentes primarias de este proyecto son los datos obtenidos a través de las visitas de campo realizadas a las instalaciones de ABOCOL S.A. a las plantas de NAN1, NAN2, y NAN3, a partir de la cual se realiza, la identificación del proceso de producción, las variables, los equipos, las condiciones de operación de cada planta, de los materiales y de las rutas de operación; posteriormente se hizo la interpretación de los diagramas de flujo del proceso, especificación de las variables y datos reales del proceso.

5.1.2 Fuentes de Información Secundaria

Las fuentes secundarias de este proyecto son los manuales de operación de las plantas de ácido nítrico NAN1, NAN2, y NAN3 y los diversos artículos científicos consultados en bases de datos como Science Direct y ACS publications tales como Modeling, simulation and optimization: Mono pressure nitric acid process, cuyo autores son Chatterjee I.B. y Joshi J.B. (2008). Y The ammonia oxidation process for nitric acid manufacture escrito por Hunt. (1958). Entre otros. Junto con libros de modelación de procesos y de obtención de ácido nítrico operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química de Seader(2000) y manuales y tutoriales de Visual Basic 6.0 como “Aprenda Visual Basic 6.0” de la Universidad de Navarra, España(1999).

5.2 POBLACION Y MUESTRA

Al ser un proyecto aplicativo, específicamente en la creación de un software a partir de la modelación de las plantas de ácido nítrico, la población para este trabajo de grado son las instalaciones de ABOCOL S.A., las cuales representan el universo.

La muestra está representada, por los datos arrojados por los distintos equipos de las tres plantas de ácido nítrico en ABOCOL S.A., los cuales permiten observar el comportamiento de las variables a lo largo del proceso. La medición se realiza periódicamente para observar el comportamiento estable del proceso y evitar que la planta este fuera de especificación.

5.3 VARIABLES

5.3.1 Operacionalización de las variables

Variables independientes

Variables Independientes	Definición	Unidades
Flujo másico de amoniaco	nivel de alimentación másico de cada una de amoniaco (NH_3)	Lb/hr
Flujo másico de aire al convertidor	Cantidad másica de aire suministrado al reactor	Lb/hr
Eficiencia del convertidor	Es la relación entre la energía útil y la energía invertida	%
Flujo de agua a la torre de absorción	Cantidad de agua utilizada para realizar el proceso de absorción	Gpm

Tiempo	Lapso necesario para el funcionamiento de Equipo y/o la planta	Hr

Tabla 1.Variables independientes

Variables dependientes

Variables Dependientes	Definición	Unidades
Temperatura	Contenido de la energía interna de las moléculas	°F
Flujo de gas al convertidor	Cantidad de gas de proceso que entra al reactor	Lb-mol/hr
Flujo de gas a la torre de absorción	Cantidad de gas de proceso que alimenta la torre de absorción	Lb-mol/hr
Composición corriente de gas de proceso	Concentración de la corriente de gas de proceso	%peso/peso
Concentración de HNO_3	Proporción de la variación acido nítrico en la torre de absorción	%peso/peso
Producción neta de HNO_3	Cantidad total de acido nítrico producido	TMD
Eficiencia global de la planta	Es la relación entre la energía útil y la energía invertida	%

Tabla 2. Variables Dependientes

Variable interviniente

Variables Dependientes	Definición	Unidades
Presión	Fuerza por unidad de área	PSIG

Tabla 3. Variable Interviniente

A continuación, también se detalla en un listado, el nombre de los equipos a los cuales se les realiza el modelo matemático, para la posterior utilización en la herramienta computacional.

La lista de equipos que se detalla a continuación, menciona los equipos correspondientes a las plantas de NAN1, NAN2, NAN3 de ABOCOL S.A.

	Equipo
1	Intercambiador

2	Caldera
3	Enfriadores (Coolers)
4	Convertidor (reactor)
5	Torre de absorción
6	Turbina
7	Compresor
8	Filtros

Tabla 4. Lista de equipos a modelar

5. 4 Modelo matemático intercambiador de calor

Para los intercambiadores de calor que se encuentran en NAN1, NAN2, NAN3, tienen las siguientes características:

Tabla 5. Características físicas de los intercambiadores de las plantas de acido nítrico de ABOCOL S.A.

Planta	Tipo de intercambiador	Material	Dimensiones	
NAN1	Tubo y coraza	acero inoxidable 321	10 ft 3.5 ft 0.05108 ft	Altura Diámetro Espesor
NAN2	Tubo y coraza	acero inoxidable 321	10 ft 27 ft 0.05108 ft	Altura Diámetro Espesor
NAN2	Tubo y coraza	acero inoxidable 430	11 ft 2.33 ft 0.0695 ft	Altura Diámetro Espesor
NAN3	Tubo y coraza	acero inoxidable 321	10 ft 3.5 ft 0.05108 ft	Altura Diámetro Espesor

Para la realización del siguiente modelado matemático, se debe tener en cuenta que el proceso se considera en estado estable, ya que opera por largos periodos sin cambios en sus condiciones de operación. Por tanto no hay alteración de las variables respecto al tiempo. Además el gasto de masa de cada fluido permanece constante y las propiedades de los fluidos siguen siendo las mismas.
Se toma un volumen de control diferencial, para el desarrollo del modelo.

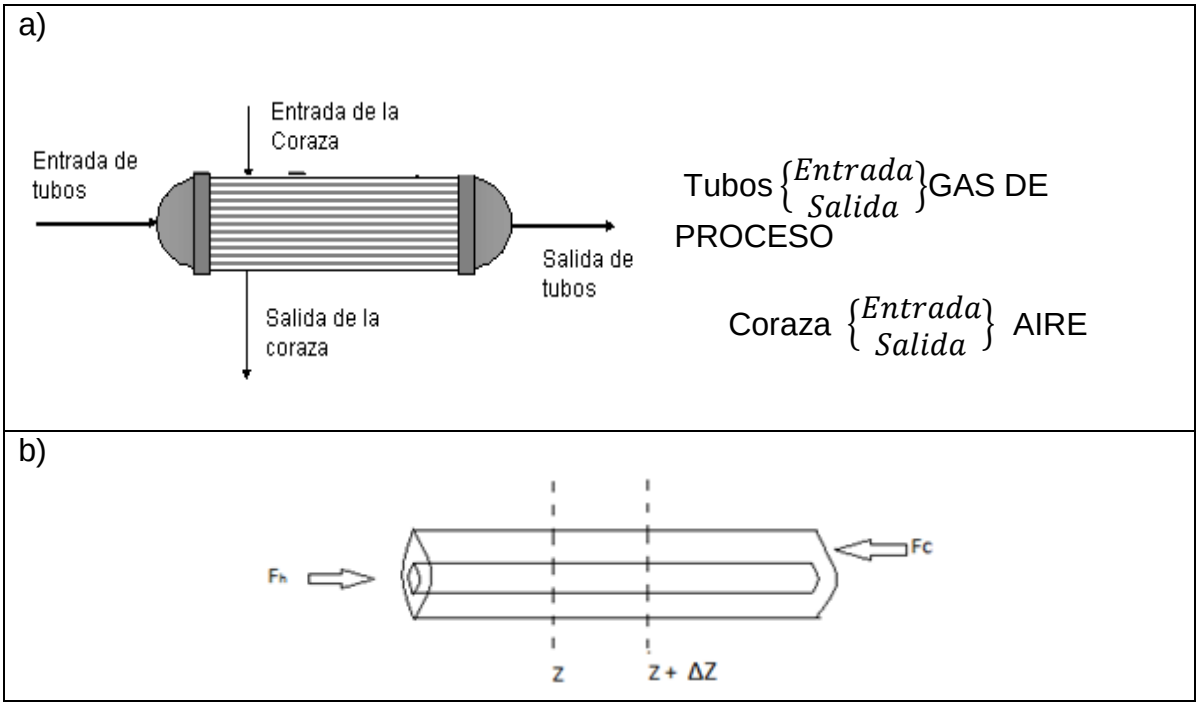


Figura 2. a) Esquema Intercambiador de calor tubos y coraza. b) Diagrama de flujo de intercambiador de calor con volumen de control.

Una forma de realizar un modelo matemático, es siguiendo una secuencia de pasos, que permitan alcanzar los objetivos propuestos, tal como se muestra a continuación.

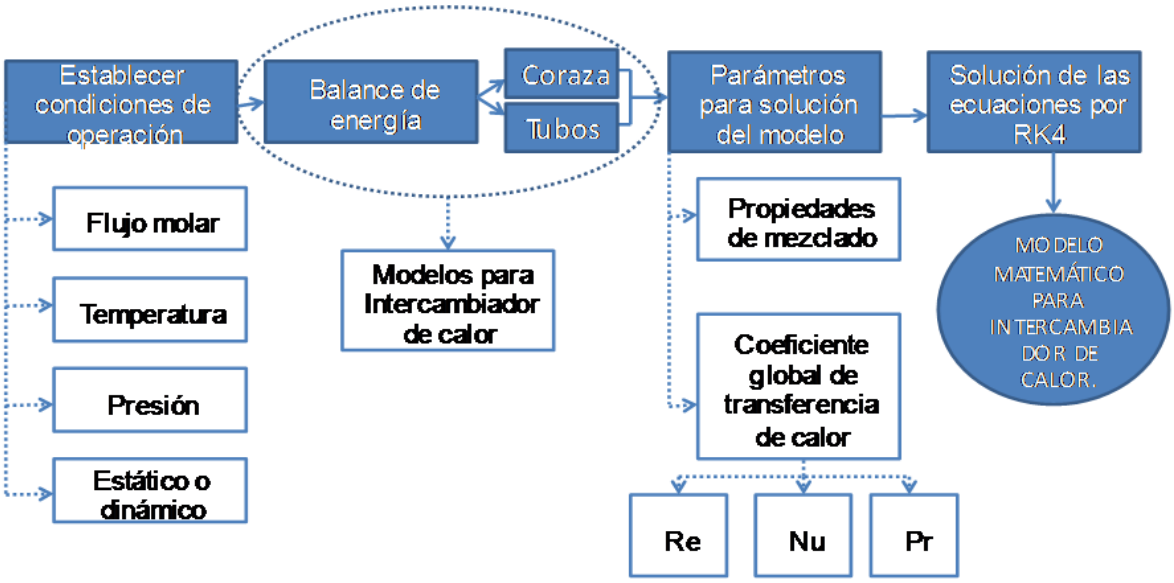


Figura 3. Algoritmo para llevar a cabo la simulación de un intercambiador de calor.

Considerando el intercambiador de tubos y coraza mostrado en la figura 2. , El flujo de gas circula dentro de los tubos y este comienza a disminuir su temperatura, por medio del vapor que fluye en la coraza, alrededor de los tubos. Al tomar el equipo en estado estacionario la temperatura solo varía respecto a la dirección axial z. También se asume que la temperatura no cambia respecto al radio de la tubería, como consecuencia se tiene a z como variable independiente y la variable de estado de interés es la temperatura.

Siguiendo el algoritmo planteado para el modelado de intercambiador de calor, se necesita el balance de energía para la caracterización de la temperatura.

Para este sistema el balance de energía es:

$$\begin{bmatrix} Entrada \text{ de energía al} \\ \text{sistema desde los} \\ \text{alrededores} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} Salida \text{ de energía al} \\ \text{sistema hacia los} \\ \text{alrededores} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} Acumulación \text{ de} \\ \text{energía dentro del} \\ \text{sistema} \end{bmatrix} = 0 \quad (1)$$

En los tubos, para el volumen de control, el balance se desarrolla:

$$\hat{H}_{Fh}\Big|_z - \hat{H}_{Fh}\Big|_{z+\Delta z} - QA_i\Delta Z = 0 \quad (2)$$

Donde en la Ecuación (2) $\hat{H}_{Fh}$ representa la energía del fluido caliente, $\dot{Q}$ es la velocidad de transferencia de calor, A_i es el área de transferencia de calor, y Z y ΔZ la dirección axial, y el incremento de la dirección axial respectivamente.

Ya que las corrientes experimentan poco o ningún cambio en sus velocidades y elevaciones, se tiene como consecuencia que los cambios de energía cinética y potencial son despreciables. La energía interna para este caso que es a volumen y presión constante, $\Delta U = Q - W$; $W = P\Delta V$ se toma la entalpía H, $H = \Delta U + P\Delta V$ que representa el calor absorbido por el sistema.

$$H = \Delta U = Q = \dot{m}CpT \quad (3)$$

Donde $\dot{m}$ es el flujo másico, Cp es la capacidad calorífica de la sustancia y T es la temperatura.

La ecuación (2) quedaría de la siguiente forma:

$$\dot{m}_{Fh}Cp_{Fh}T\Big|_z - \dot{m}_{Fh}Cp_{Fh}T\Big|_{z+\Delta z} - \dot{Q}A_i\Delta Z = 0 \quad (4)$$

Para el desarrollo de la Ecuación (4), se debe tener en cuenta:

- El cambio de la energía en los tubos, es representada por una pérdida de calor.
- la definición de la derivada, para así obtener la ecuación diferencial que describa el comportamiento de los fluidos en los tubos del intercambiador.

$\dot{Q}$, en la Ecuación (4), representa la velocidad de transferencia de calor, de acuerdo a la ley de Newton del enfriamiento. $\dot{Q} = U_T LMDT$, tal que $LMDT$ representa la diferencia de temperatura media logarítmica y U_T es el coeficiente de transferencia de calor total.

$$LMDT = \frac{(T_{hi} - T_{co}) - (T_{ho} - T_{ci})}{\ln\left(\frac{T_{hi} - T_{co}}{T_{ho} - T_{ci}}\right)} \tag{5}$$

T_{hi} es la temperatura de entrada fluido caliente, T_{co} es la temperatura de salida fluido frio, T_{ho} es la temperatura de salida fluido caliente y T_{ci} Temperatura de entrada fluido frio.

En la coraza, para el volumen de control el balance se desarrolla:

$$\hat{H}_{Fh}\Big|_{z+\Delta z} - \hat{H}_{Fh}\Big|_{z} + QA_o\Delta Z = 0 \tag{6}$$

Al igual que la Ecuación (2), la Ecuación (6) tiene las mismas consideraciones. Para el desarrollo de la Ecuación (6), adicionalmente hay que tener en cuenta que:

- El cambio de la energía en la coraza, es representada por una ganancia de calor.

$$\dot{m}_{Fc} Cp_{Fc} T\Big|_{z+\Delta z} - \dot{m}_{Fh} Cp_{Fh} T\Big|_{z} + \dot{Q}A_o\Delta Z = 0 \tag{7}$$

Las ecuaciones que representan el modelo matemático para los intercambiadores presentes en las plantas de ácido nítrico son:

Tabla 6. Modelo matemático intercambiador tubo y coraza

Tubos $\frac{dT_{ho}}{dz} = -\frac{U_T A_i \frac{(T_{hi} - T_{co}) - (T_{ho} - T_{ci})}{\ln\left(\frac{T_{hi} - T_{co}}{T_{ho} - T_{ci}}\right)}}{\dot{m}_{Fh} Cp_{Fh}}$
Coraza $\frac{dT_{co}}{dz} = \frac{U_T A_o \frac{(T_{hi} - T_{co}) - (T_{ho} - T_{ci})}{\ln\left(\frac{T_{hi} - T_{co}}{T_{ho} - T_{ci}}\right)}}{\dot{m}_{Fc} Cp_{Fc}}$

5. 4. 1Parámetros para solucionar modelo matemático de intercambiador de calor

Para resolver este modelo es fundamental hallar el coeficiente de transferencia global de calor, teniendo en cuenta que la relación que se plantea es válida para superficies limpias o con factor de incrustación (depende de temperatura de operación y velocidad de fluidos) despreciable que está representado por la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{U_T A_s} = \frac{1}{U_T A_i} = \frac{1}{U_T A_o} = \frac{1}{h_f A_i} + R_{pared} + \frac{1}{h_c A_o} \quad (8)$$

Se asume que la conductividad térmica del material es alto, por lo tanto la resistencia térmica de la pared se hace despreciable ($R_{pared} \approx 0$) y las superficies interior y exterior del intercambiador son casi idénticas ($A_i \approx A_o \approx A_s$). Entonces la Ecuación (8) para el coeficiente de transferencia de calor se simplifica para quedar

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{1}{h_c} \quad (9)$$

Para calcular el coeficiente de transferencia global de calor, es necesario hallar h_f y h_c, que son los coeficientes de calor de tubos y coraza respectivamente; y están determinados por:

$$h_f = \frac{Nu_f k_f}{L} \qquad h_c = \frac{Nu_c k_c}{L} \tag{10}$$

Donde Nu es el número de Nusselt, k_f es la conductividad térmica del fluido y L es la longitud característica. Es necesario conocer $Nu_f = Nu_C = Nu$, el cual se puede calcular dependiendo de diversos factores:

a) $Nu = 0.023 \mathrm{Re}_D^{4/5} \mathrm{Pr}^n$ (11) Correlación de Dittus & Boelter

Valido para: - rangos 0.7<Pr<160, Re_D>10000 y L/D >1
- Condiciones de temperatura de pared y flujo de calor constantes.
- Flujo turbulento
- Temperatura de fluido > 400K

b) $Nu = 0.023 \mathrm{Re}_D^{4/5} \mathrm{Pr}^{0.4}$ (12) Correlación de Sieder & Tate

Valido para: - rangos 0.7<Pr<16700 y Re_D>10^4
- Condiciones de temperatura de pared y flujo de calor constantes.
- Flujo turbulento
- Temperatura de fluido > 800K
- Fluidos que se calientan.

c) $$Nu = \frac{(f/2)\mathrm{Re}_D \mathrm{Pr}}{1.07 + 900/\mathrm{Re}_D - 0.63/(1+10\mathrm{Pr}) + 12.7(f/2)^{1/2}(\mathrm{Pr}^{2/3}-1)}$$

(13) Correlación de Pethukov & Kirilov

Valido para: - rangos 0.5<Pr<10^6, 4000<Re_D>5*10^6
- Condiciones de temperatura de pared y flujo de calor constantes.
- Flujo turbulento
- Temperatura de fluido > 1000K

El número de Nusselt a su vez, depende del número de Reynolds Re_D y del número de Prandtl.

$$\mathrm{Re}_D = \frac{G_T D}{\mu} \tag{14}$$

$$\mathrm{Pr} = \frac{C_P \mu}{k} \tag{15}$$

Dentro de los parámetros requeridos para calcular el U_T , es necesario recurrir a la propiedad de mezclado para calcular la viscosidad; la cual viene dada para una mezcla gaseosa, por la ecuación de Wilke.[9]

$$\mu = \mu_{mezcla} = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i \mu_i}{\sum_{i=1}^{n} x_j \varphi_{ij}} \tag{16}$$

$x_{i,j} = \text{fraccion molar de i y j}$

$\mu_{i,j} = \text{viscosidades de i y j a la presion y temperatura del sistema}$

$\mathrm{M}_{i,j} = \text{Peso molecular de i y j}$

$$\varphi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j}\right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{1/2} \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{1/2}\right]^2$$

Las mezclas de gases en composición constante pueden tratarse exactamente de la misma forma que los gases puros. Por tanto, el cálculo de la capacidad calorífica de una mezcla de gases se hace tomando el promedio molar de las capacidades caloríficas de cada especie. Suponiendo que se tienen las moles formadas de A, B y C, y sean y_a, y_b y y_c las fracciones molares de estas especies. La capacidad calorífica de la mezcla está dada por:

$$C_{p_{mezcla}} = y_A C_{p_A} + y_B C_{p_B} + y_C C_{p_C} \tag{17}$$

Donde C_{PA}, C_{PB} y C_{PC} son las capacidades caloríficas molares de A, B y C puras.[9]

Tabla 7. Resumen ecuaciones modelo matemático intercambiador tubo y coraza

<table>
<tr><td>MODELO MATEMATICO</td><td colspan="3">PARAMETROS</td></tr>
<tr><td><u>Tubos</u>
$$\frac{dT_{ho}}{dz} = -\frac{U_T A_i \dfrac{(T_{hi}-T_{co})-(T_{ho}-T_{ci})}{\ln\left(\dfrac{T_{hi}-T_{co}}{T_{ho}-T_{ci}}\right)}}{\dot{m}_{Fh} Cp_{Fh}}$$
<u>Coraza</u>
$$\frac{dT_{co}}{dz} = \frac{U_T A_o \dfrac{(T_{hi}-T_{co})-(T_{ho}-T_{ci})}{\ln\left(\dfrac{T_{hi}-T_{co}}{T_{ho}-T_{ci}}\right)}}{\dot{m}_{Fc} Cp_{Fc}}$$</td><td colspan="3">• $\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{1}{h_c}$
• $h_f = \frac{Nu_f k_f}{L} \quad h_c = \frac{Nu_c k_c}{L}$
• $Nu = 0.023 \mathrm{Re}_D^{4/5} \mathrm{Pr}^n$
• $\mathrm{Re}_D = \frac{G_T D}{\mu}$
• $\mathrm{Pr} = \frac{C_P \mu}{k}$
• $\mu = \mu_{mezcla} = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i \mu_i}{\sum_{i=1}^{n} x_j \varphi_{ij}}$
• $\varphi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}}\left(1+\frac{M_i}{M_j}\right)^{-1/2}\left[1+\left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{1/2}\left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{1/2}\right]^2$
• $C_{p_{mezcla}} = y_A C_{p_A} + y_B C_{p_B} + y_C C_{p_C}$</td></tr>
<tr><td colspan="4">DATOS DE ENTRADA</td></tr>
<tr><td>NAN - 1</td><td>NAN - 2</td><td colspan="2">NAN - 3</td></tr>
<tr><td>• Flujo másico (lb/hr)= 106505.4
• Temperatura (°F) = 1201
• Presión (PSIG) = 117</td><td>• Flujo másico (lb/hr)= 163608
• Temperatura (°F) = 1200
• Presión (PSIG) = 113</td><td colspan="2">• Flujo másico (lb/hr)= 119656
• Temperatura (°F) = 1190
• Presión (PSIG) = 113</td></tr>
</table>

Para finalizar la solución del modelo, de acuerdo al algoritmo planteado en la Figura 3, se requiere un procedimiento matemático para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales.

Al ser un sistema de dos ecuaciones diferenciales ordinarias con dos incógnitas, el método numérico que proporciona soluciones más aproximadas, es el método de Runge-Kutta de cuarto orden (ANEXO C), que a pesar de ser un método multipasos, su gran ventaja es la exactitud.

5.5 Modelo matemático de caldera de vapor residual

Las calderas que se encuentran en las tres plantas de ácido nítrico de ABOCOL S.A. tienen las siguientes características:

Tabla 8. Características físicas de las calderas de vapor residual de las plantas de acido nítrico de ABOCOL S.A.

Planta	Tipo de Caldera	Material	Dimensiones	
NAN1	Tubo y coraza	Tubos: acero inoxidable 321	20 ft	Largo
		Coraza: Acero al carbón	3.42 ft	Diámetro
NAN1	Tubo y coraza	Tubos: acero inoxidable 430	20 ft	Largo
		Coraza: Acero al carbón	3.42 ft	Diámetro
NAN2	Tubo y coraza	Tubos: acero inoxidable 430	20 ft	Largo
		Coraza: Acero al carbón	3.42 ft	Diámetro
NAN3	Tubo y coraza	Tubos: acero inoxidable 321	20 ft	Largo
		Coraza: Acero al carbón	3.42 ft	Diámetro
NAN3	Tubo y coraza	Tubos: acero inoxidable 430	20 ft	Largo
		Coraza: Acero al carbón	3.42 ft	Diámetro

Para el modelo matemático de caldera de vapor residual, es importante tener en cuenta, que una caldera es un intercambiador con un nombre específico, que refleja la aplicación para la cual se usa, en este caso, uno de los fluidos absorbe calor y se vaporiza. Lo que significa que dentro del equipo sucede un cambio de fase.

Al igual que el funcionamiento del intercambiador, la caldera se considera en estado estable, el gasto de masa de cada fluido permanece constante y las propiedades de los fluidos siguen siendo las mismas, exceptuando la zona donde ocurre el cambio de fase.[10][11]

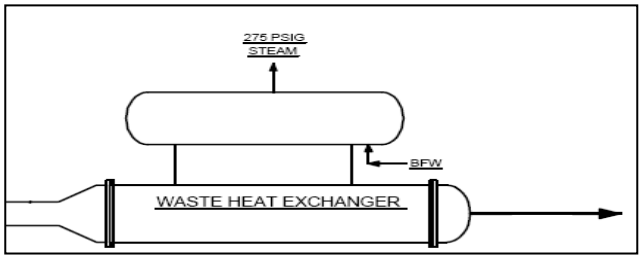


Figura 4. Esquema de caldera de vapor residual

La siguiente secuencia de pasos, permite obtener el modelo matemático de las calderas, tal como se muestra a continuación.

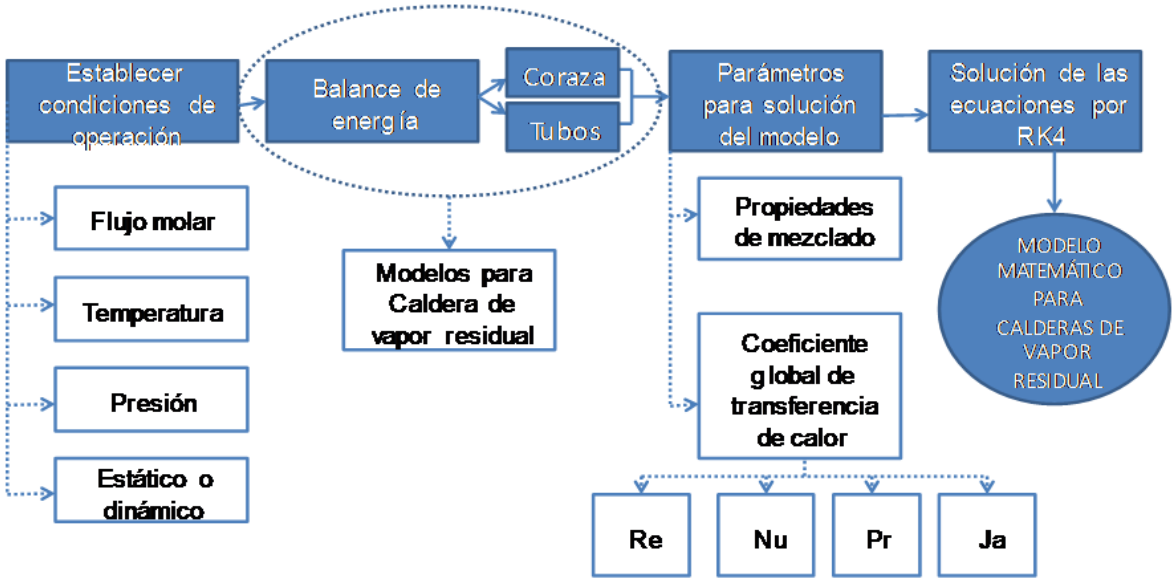


Figura 5. Algoritmo para llevar a cabo simulación de caldera de calor residual.

En la caldera de vapor residual, el flujo de gas de proceso circula dentro de los tubos, y la temperatura de este disminuye, debido al flujo de agua que va por la coraza, el cual le retira calor al gas de proceso y se vaporiza en la coraza. Al tomar el equipo en estado estacionario la temperatura solo varía respecto a la dirección axial z. Se tiene a z como variable independiente y la variable de estado de interés es la temperatura.[12]

En la caldera, se realiza el balance de energía, en el cual se usa la Ecuación (1), al igual que para un intercambiador.

En los tubos, para el volumen de control, el balance se desarrolla de acuerdo a la Ecuación (2), la cual de acuerdo a la explicación dada en el modelo de intercambiador de calor, y las Ecuaciones (4) y (5), permiten tener la ecuación que describa el comportamiento de la caldera en los tubos.

En la coraza, el balance de energía se desarrolla tal como se muestra en la Ecuación (6), y al tener en cuenta las consideraciones planteadas en la parte de tubos se obtiene de igual forma la Ecuación (7), como en el intercambiador:

$$\dot{m}_{Fc} Cp_{Fc} T\big|_{z+\Delta z} - \dot{m}_{Fh} Cp_{Fh} T\big|_{z} + \dot{Q} A_o \Delta Z = 0 \qquad (7)$$

$\dot{Q}$ en la Ecuación (7) representa la velocidad de transferencia de calor, de acuerdo a la ley de Newton del enfriamiento. $\dot{Q} = U_C LMDT$, como ya se mencionó anteriormente $LMDT$ representa la diferencia de temperatura media logarítmica y U_C es el coeficiente de transferencia de calor total en la coraza. Teniendo en cuenta que hay un cambio de fase en la coraza, este coeficiente depende de:

$$U_C = U_C\left(\Delta T, g\left(\rho_f - \rho_g\right), h_{fg}, \sigma, L, \rho, C_p, k, \mu\right) \quad (18)$$

Donde $\Delta T = T_w - T_{sat}$ representa el incremento de temperatura entre la pared y el líquido saturado. T_w es la temperatura de la pared, mientras que T_{sat} es la temperatura de saturación. El término $g\left(\rho_f - \rho_g\right)$ es la fuerza boyante, h_{fg} es el calor latente de cambio de fase, σ es la tensión superficial, que para este caso, por encontrarse el agua en estado gaseoso, su valor tiende a cero; ρ es la densidad, c_p el calor específico, k la conductividad térmica, y μ la viscosidad del líquido o del vapor.

Las ecuaciones que representan el modelo matemático para las calderas de vapor residual, presentes en las plantas de ácido nítrico son:

Tabla 9. Modelo matemático Caldera de vapor residual

Tubos $\frac{dT_{ho}}{dz} = -\frac{U_T A_i \frac{(T_{hi} - T_{co}) - (T_{ho} - T_{ci})}{\ln\left(\frac{T_{hi} - T_{co}}{T_{ho} - T_{ci}}\right)}}{\dot{m}_{Fh} Cp_{Fh}}$
Coraza $\frac{dT_{co}}{dz} = \frac{U_c A_o \frac{(T_{hi} - T_{co}) - (T_{ho} - T_{ci})}{\ln\left(\frac{T_{hi} - T_{co}}{T_{ho} - T_{ci}}\right)}}{\dot{m}_{Fc} Cp_{Fc}}$

5. 5. 1Parámetros para solucionar modelo matemático de caldera de vapor residual

Para resolver el modelo de caldera, es necesario calcular el coeficiente de transferencia global de calor, al igual que para intercambiador de calor, se tiene en cuenta que la relación que se plantea es válida para superficies limpias o con factor de incrustación (depende de temperatura de operación y velocidad de fluidos) despreciable que está representado por la Ecuación (8) para el lado tubos y la Ecuación (18) para la coraza:

$$\frac{1}{U_T A_s} = \frac{1}{U_T A_i} = \frac{1}{U_T A_o} = \frac{1}{h_f A_i} + R_{pared} + \frac{1}{h_c A_o} \tag{8}$$

$$\frac{1}{U_C A_s} = \frac{1}{U_C A_i} = \frac{1}{U_C A_o} = \frac{1}{h_f A_i} + R_{pared} + \frac{1}{h_c A_o} \tag{19}$$

Para estas ecuaciones, se asume que la conductividad térmica del material es alto, por tanto, la resistencia térmica de la pared se hace despreciable ($R_{pared} \approx 0$), las superficies interior y exterior del intercambiador son casi idénticas ($A_i \approx A_o \approx A_s$), Al ser dos coeficientes de transferencia de calor distintos, U_T y U_C para tubos y coraza respectivamente, se hace cero el coeficiente de calor de coraza en U_T y el coeficiente de calor de tubos en U_C. Entonces las Ecuaciones (8) y (18) quedarían así:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} \tag{20}$$

$$\frac{1}{U_C} = \frac{1}{h_C} \tag{21}$$

Y como se mencionó en la Ecuación (10) $h_f = \frac{Nu_f k_f}{L}$ y $h_c = \frac{Nu_c k_c}{L}$

Nu_f es diferente de Nu_C, Nu_f se calcula tal como está en los parámetros de cálculo para intercambiador de calor, es decir, depende de las ecuaciones(11) a la (17).

Nu_C , depende del fenómeno de ebullición que se da en la coraza, por la transmisión de calor, donde a partir de experimentación y estudio se llega a la correlación de la ecuación de Rohsenow.[14]

$$Nu_C = \frac{Ja^2}{C_{sf}}.\Pr.m \tag{22}$$

Donde Ja es el número de Jakob:

$$Ja = \frac{C_p \Delta T}{h_{fg}} = \frac{\text{Calor sensible}}{\text{Calor latente}} \tag{23}$$

m toma el valor de 2 para el agua, y Csf es un valor constante dependiente de las propiedades del par líquido-superficie que está tabulado. Ver anexo C.1 [15].

Para hallar el ΔT, se debe tener el valor de la temperatura de saturación, T_{sat}, hallado en el anexo C.2 [16]; y el valor de h_{fg} se encuentra tabulado también. Ver Anexo C.3[17]

Tabla 10. Resumen ecuaciones modelo matemático Caldera de vapor residual

MODELO MATEMATICO	PARAMETROS
Tubos $\frac{dT_{ho}}{dz} = -\frac{U_T A_i \frac{(T_{hi}-T_{co})-(T_{ho}-T_{ci})}{\ln\left(\frac{T_{hi}-T_{co}}{T_{ho}-T_{ci}}\right)}}{\dot{m}_{Fh} Cp_{Fh}}$ Coraza $\frac{dT_{co}}{dz} = \frac{U_c A_o \frac{(T_{hi}-T_{co})-(T_{ho}-T_{ci})}{\ln\left(\frac{T_{hi}-T_{co}}{T_{ho}-T_{ci}}\right)}}{\dot{m}_{Fc} Cp_{Fc}}$	• $\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f}$ • $\frac{1}{U_C} = \frac{1}{h_C}$ • $h_f = \frac{Nu_f k_f}{L}$ y $h_c = \frac{Nu_c k_c}{L}$ • $Nu_C = \frac{Ja^2}{C_{sf}}.\Pr.m$ • $Nu = 0.023 \mathrm{Re}_D^{4/5} \Pr^n$ • $Ja = \frac{C_p \Delta T}{h_{fg}} = \frac{\text{Calor sensible}}{\text{Calor latente}}$ • $\mathrm{Re}_D = \frac{G_T D}{\mu}$ • $\Pr = \frac{C_P \mu}{k}$ • $\mu = \mu_{mezcla} = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i \mu_i}{\sum_{i=1}^{n} x_j \varphi_{ij}}$ • $\varphi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}}\left(1+\frac{M_i}{M_j}\right)^{-1/2}\left[1+\left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{1/2}\left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{1/2}\right]^2$ • $C_{p_{mezcla}} = y_A C_{p_A} + y_B C_{p_B} + y_C C_{p_C}$

DATOS DE ENTRADA		
NAN - 1	NAN - 2	NAN - 3
• Flujo másico (lb/hr)= 106505.4 • Temperatura (°F) = 1033 • Presión (PSIG) = 110	• Flujo másico (lb/hr)= 163608 • Temperatura (°F) = 1031 • Presión (PSIG) = 110	• Flujo másico (lb/hr)= 119656 • Temperatura (°F) = 1033 • Presión (PSIG) = 111.5

Para finalizar la solución del modelo, de acuerdo al algoritmo planteado en la Figura 4. Al igual que el modelo de intercambiador de calor se usa el método de Runge-Kutta de cuarto orden (ANEXO D).

5. 6 Modelo matemático Enfriador

Los enfriadores que se encuentran en las plantas de ácido nítrico de ABOCOL S.A. Presentan las siguientes características:

Tabla 11. Características físicas de los enfriadores de las plantas de acido nítrico de ABOCOL S.A.

Planta	Tipo de Cooler	Material	Dimensiones
NAN1	Tubo y coraza	Coraza: acero inoxidable 430 Tubos: zirconio	42 ½" x 34´10 ¼" largo
NAN2	Tubo y coraza	Coraza: acero inoxidable 430 Tubos: zirconio	42 ½" x 34´10 ¼" largo
NAN3	Tubo y coraza	Coraza: acero inoxidable 430 Tubos: zirconio	42 ½" x 34´10 ¼" largo

Para el modelo matemático de enfriador, es importante tener en cuenta, que es un tipo de intercambiador con un nombre específico, que refleja la aplicación para la cual se usa, en este caso, es retirar calor a uno de los fluidos. Lo que significa que dentro del equipo no sucede un cambio de fase.

Al igual que el funcionamiento del intercambiador y la caldera, para el enfriador se considera en estado estable, el gasto de masa de cada fluido permanece constante y las propiedades de los fluidos siguen siendo las mismas,

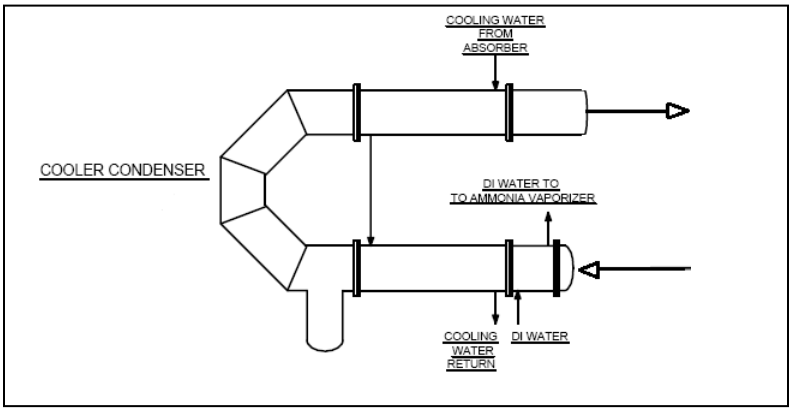


Figura 6. Esquema cooler condenser

La secuencia de pasos, que permite el desarrollo del modelo para un enfriador, es igual al esquema mostrado para los intercambiadores de calor antes mencionados (ver Figura 3).

Para el Enfriador o cooler, este funciona como un sistema de enfriamiento, donde el gas de proceso va a través de los tubos y el líquido refrigerante, en este caso agua, por la coraza. Tiene el mismo comportamiento del intercambiador de calor, donde aquí la función principal es la reducción de temperatura del gas de proceso. Por tanto es factible que el cooler se pueda someter a las mismas condiciones de proceso que los demás equipos de transferencia de calor, lo que conlleva a que el modelo matemático se desarrolle, muy similar al de intercambiador.[18][19]

Al tomar el equipo en estado estacionario la temperatura solo varía respecto a la dirección axial z. Se tiene a z como variable independiente y la variable de estado de interés es la temperatura.

Se realiza el balance de energía, en el cual se usa la ecuación (1), al igual que para un intercambiador.

En los tubos, para el volumen de control, el balance se desarrolla de acuerdo a la Ecuación (2), la cual de acuerdo a la explicación dada en el modelo de intercambiador de calor, y las Ecuaciones (4) y (5), permiten tener la ecuación que describa el comportamiento en los tubos.

En la coraza, el balance de energía se desarrolla tal como se muestra en la Ecuación (6), y al tener en cuenta las consideraciones planteadas en la parte de tubos se obtiene de igual forma la Ecuación (7), como en el intercambiador:

$$\dot{m}_{Fc} Cp_{Fc} T\big|_{z+\Delta z} - \dot{m}_{Fh} Cp_{Fh} T\big|_{z} + \dot{Q} A_o \Delta Z = 0 \quad (7)$$

El cambio de la energía en la coraza, es representada por una ganancia de calor.

Las ecuaciones que representan el modelo matemático para las calderas de vapor residual, presentes en las plantas de ácido nítrico son:

Tabla 12. Modelo matemático cooler-condenser

Tubos	Coraza
$\frac{dT_{ho}}{dz} = -\frac{U_T A \frac{(T_{hi} - T_{co}) - (T_{ho} - T_{ci})}{\ln\left(\frac{T_{hi} - T_{co}}{T_{ho} - T_{ci}}\right)}}{\dot{m}_{Fh} Cp_{Fh}}$	$\frac{dT_{co}}{dz} = \frac{U_T A \frac{(T_{hi} - T_{co}) - (T_{ho} - T_{ci})}{\ln\left(\frac{T_{hi} - T_{co}}{T_{ho} - T_{ci}}\right)}}{\dot{m}_{Fc} Cp_{Fc}}$

Los parámetros requeridos para solucionar estas ecuaciones, están en la sección 5.4.1 (parámetros para solucionar modelo matemático de intercambiador de calor).

Resumen ecuaciones utilizadas

Tabla 13. Resumen ecuaciones modelo matemático cooler condenser

<table>
<tr><th>MODELO MATEMATICO</th><th>PARAMETROS</th></tr>
<tr><td><u>Tubos</u>
$$\frac{dT_{ho}}{dz} = -\frac{U_T A \dfrac{(T_{hi}-T_{co})-(T_{ho}-T_{ci})}{\ln\left(\dfrac{T_{hi}-T_{co}}{T_{ho}-T_{ci}}\right)}}{\dot{m}_{Fh} Cp_{Fh}}$$
<u>Coraza</u>
$$\frac{dT_{co}}{dz} = \frac{U_T A \dfrac{(T_{hi}-T_{co})-(T_{ho}-T_{ci})}{\ln\left(\dfrac{T_{hi}-T_{co}}{T_{ho}-T_{ci}}\right)}}{\dot{m}_{Fc} Cp_{Fc}}$$</td><td>• $\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{1}{h_c}$
• $h_f = \frac{Nu_f k_f}{L} \quad h_c = \frac{Nu_c k_c}{L}$
• $Nu = 0.023 \mathrm{Re}_D^{4/5} \mathrm{Pr}^n$
• $\mathrm{Re}_D = \frac{G_T D}{\mu}$
• $\mathrm{Pr} = \frac{C_P \mu}{k}$
• $\mu = \mu_{mezcla} = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i \mu_i}{\sum_{i=1}^{n} x_j \varphi_{ij}}$
• $\varphi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}}\left(1+\frac{M_i}{M_j}\right)^{-1/2}\left[1+\left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{1/2}\left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{1/2}\right]^2$
• $C_{p_{mezcla}} = y_A C_{p_A} + y_B C_{p_B} + y_C C_{p_C}$</td></tr>
<tr><td colspan="2">DATOS DE ENTRADA</td></tr>
<tr><td colspan="2"><table>
<tr><th>NAN – 1</th><th>NAN - 2</th><th>NAN - 3</th></tr>
<tr><td>• Flujo másico (lb/hr)= 106505.4
• Temperatura (°F) = 610
• Presión (PSIG) = 107</td><td>• Flujo másico (lb/hr)= 163608
• Temperatura (°F) = 385
• Presión (PSIG) = 110</td><td>• Flujo másico (lb/hr)= 119656
• Temperatura (°F) = 610
• Presión (PSIG) = 108</td></tr>
</table></td></tr>
</table>

5.7 Modelo matemático reactor

Para los reactores que se encuentran en NAN1, NAN2, NAN3, tienen las siguientes características:

Tabla 14. Características físicas de reactores de las plantas de acido nítrico de ABOCOL S.A.

Planta	Tipo de reactor	Tipo de intercambiador	Material	Dimensiones
NAN1	PBR	Tubo y coraza	Acero inoxidable 321 gaza platino-rodio (90%-10%)	15 ft Altura 5.25 ft Diámetro
NAN2	PBR	Tubo y coraza	Acero inoxidable 321 gaza platino-rodio (90%-10%)	15 ft Altura 5.25 ft Diámetro
NAN3	PBR	Tubo y coraza	Acero inoxidable 321 gaza platino-rodio (90%-10%)	15 ft Altura 5.25 ft Diámetro

La siguiente secuencia de pasos, permite obtener el modelo matemático de reactores, tal como se muestra a continuación:

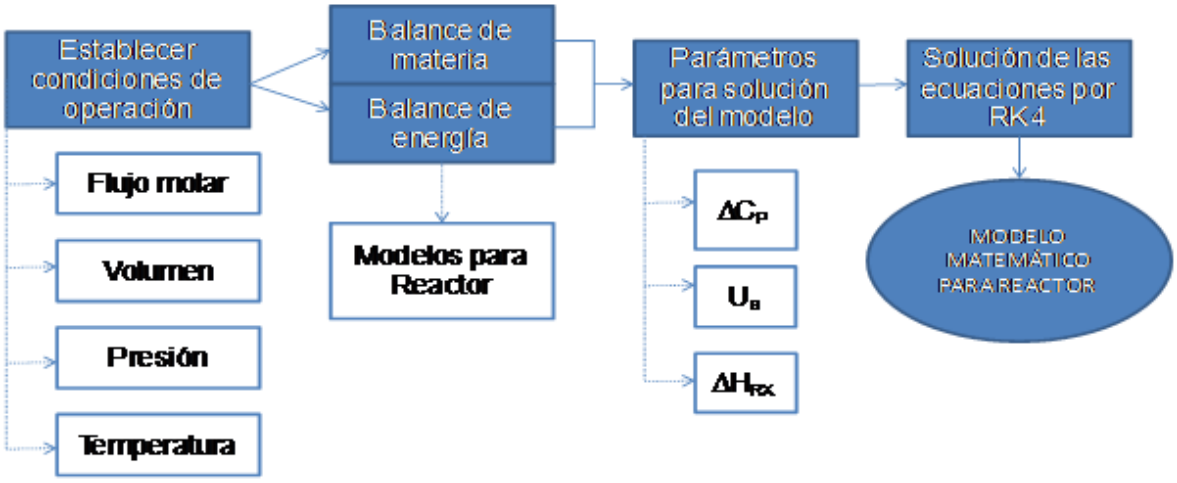


Figura 7. Algoritmo para llevar a cabo simulación de reactor.

El modelo matemático a desarrollar, parte del hecho de que el proceso se considera en estado estable, no hay una alteración de las variables respecto al tiempo. El reactor es de lecho empacado, con catalizador platino- rodio, en porcentajes 90%-10% respectivamente. Y se toma un volumen de control.

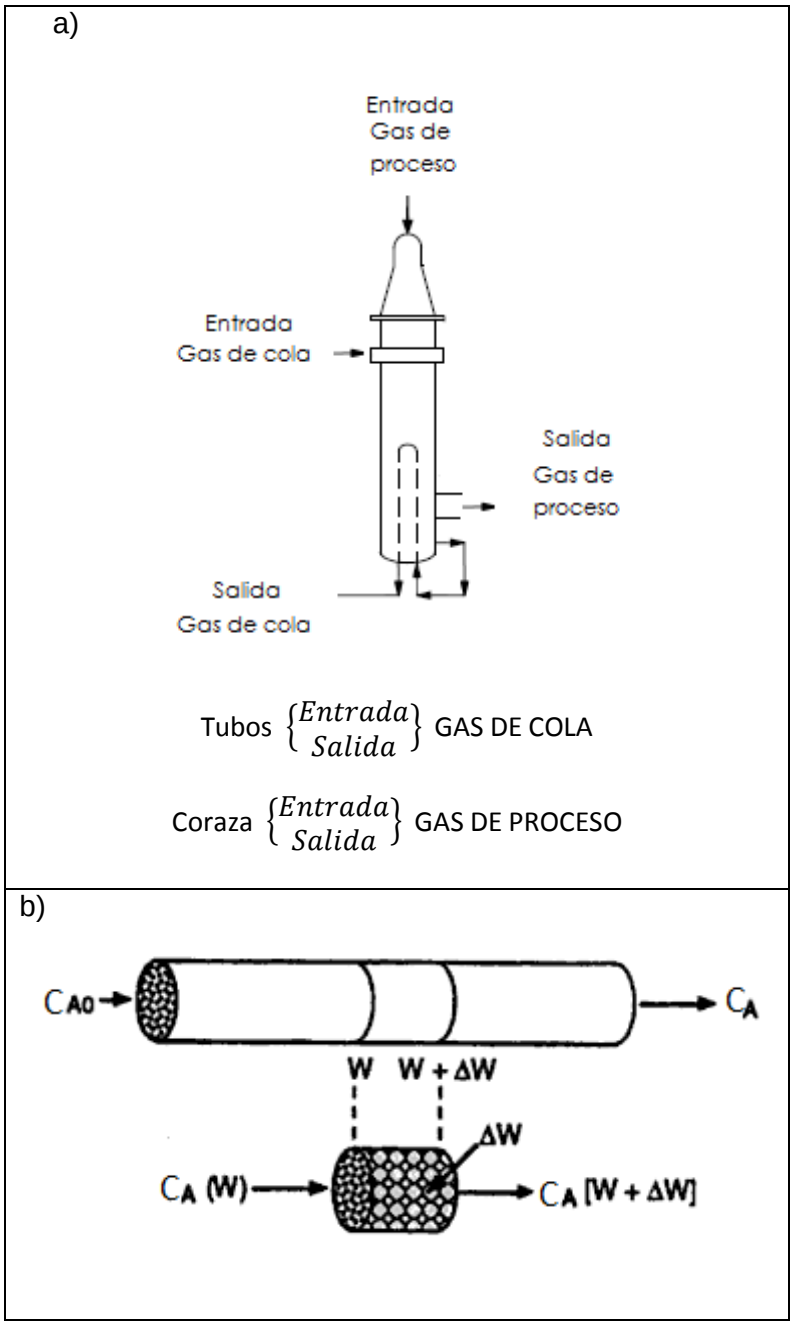


Figura 8. a) Esquema reactor. b) Volumen de control para un reactor de lecho empacado.[tomado de Elementos de ingeniería de las reacciones químicas, H. Scott Fogler, 4ta edición, pág. 18][20]

En el reactor se pasa a través de la gasa de platino-rodio, aire y amoniaco, ocurren las siguientes reacciones:

a) $4\ NH_3 + 5\ O_2 \longrightarrow 4\ NO + 6\ H_2O + 216.600$ calorías

b) $4\ NH_3 + 3\ O_2 \longrightarrow 2\ N_2 + 6\ H_2O + 302.700$ calorías

c) $4\ NH_3 + 6\ NO \longrightarrow 5\ N_2 + 6\ H_2O + 431.900$ calorías

Como se mencionó en el marco teórico, la primera reacción es la deseada en la producción del ácido nítrico y es la que más se da a alta temperatura (1.700 °F) con un flujo rápido a través de la gasa catalizadora de platino, ya que a temperaturas de gasa por encima de 1787 °F y bajo suministro de oxígeno, la segunda reacción se favorece. Cuando la conversión es incompleta (demasiada velocidad) la reacción (c) toma lugar.

La reacción a), es exotérmica, pero la temperatura de esta, debe mantenerse en 1700 °F, por tanto el reactor tiene un serpentín en la parte inferior, que funciona como un intercambiador, el cual permite mantener la temperatura.

El reactor PBR, no tiene gradiente radiales de concentración, temperatura o de velocidad de reacción. El balance de moles generalizado, basado en el peso de catalizador.

$$\begin{aligned} &\text{entrada} - \text{salida} + \text{generacion} = \text{acumulación} \\ &F_A(W) - F_A(W+\Delta W) + r'_A \Delta W = 0 \end{aligned} \qquad (24)$$

Donde F_A es el flujo molar del compuesto de interés, que es el amoniaco, r'_A es la velocidad de reacción y W y ΔW es el peso de catalizador y el incremento del peso de catalizador respectivamente.

Después de dividir entre ΔW y tomar el límite cuando $\Delta W \longrightarrow 0$, y teniendo en cuenta que:

$$F_A = F_{A0} - F_{A0}X \qquad (25)$$

Se obtiene la forma diferencial del balance molar para un reactor de lecho empacado:

$$F_{A0}\frac{dX}{dW} = -r'_A \qquad (26)$$

La caída de presión en el reactor es despreciable, por tanto el volumen se mantiene constante.

En el caso de la velocidad de reacción, a pesar de los muchos estudios realizados para este importante proceso de obtención de NO por oxidación de amoniaco, no existe una ley cinética acertada que lo describa específicamente con el catalizador Platino/Rodio. La oxidación de amoníaco mediante catalizador de platino es considerado un clásico ejemplo de una fuerte reacción heterogénea exotérmica catalizada con regímenes críticos de calor de ignición y extinción, en donde claramente se debe tener en cuenta que ha temperaturas alejadas de los 1700°F se favorecen reacciones indeseadas para la producción del óxido de Nitrógeno. Todos los intentos por suprimir los regímenes críticos y obtener la cinética intrínseca para concentraciones y temperaturas usadas en la industria han fallado. Por esta razón, utilizamos la velocidad de reacción de un proceso similar, con condiciones iguales (Alta temperatura, presiones cercanas y calor de reacción similares) pero con distinto catalizador (Co_3O_4). [21]

$$r_A^{'} = K\left[NH_3\right]^{0.36}\left[O_2\right]^{0.14} \tag{27}$$

Para K, que es la constante de velocidad, está definida por la ecuación de Arrhenius:

$$K = A \cdot e^{\frac{-Ea}{RT}} \tag{28}$$

Donde A es el denominado factor preexponencial y E es la energía de activación de la reacción, R es la constante de los gases y “T” es la temperatura en grados K.

El balance de energía, en el reactor esta dado por el balance de energía para un reactor no isotérmico empacado (PBR) en estado estacionario con cambiador de calor. El flujo de calor $\Delta\dot{Q}$, se da en términos del coeficiente total de transferencia de calor U; el área de intercambio de calor a y la diferencia entre la temperatura del refrigerante T_a y la temperatura del reactor, T.

Está dado por la siguiente expresión:

$$\frac{dT}{dW} = \frac{\frac{U_a}{\rho_a}\left(T_a - T\right) + r_A'\Delta H_{RX}(T)}{F_{ao}\left(\sum \Theta_i C_p + \Delta C_p X\right)} \tag{29}$$

Donde U_a es el coeficiente global de calor, ρ_b es la densidad de bulto ΔH_{RX} es el calor de reacción, F_{ao} es el flujo molar inicial de amoniaco, θ_i es moles i/moles a, C_P es la capacidad calorífica y X es la conversión del reactor.

Las ecuaciones que describen el modelo, son ecuaciones independientes, y de fácil solución las cuales son:

Tabla 15. Modelo matemático de reactor

Balance de materia: $$F_{A0}\frac{dX}{dW} = -r'_A$$ $$r'_A = K[NH_3]^{0.36}[O_2]^{0.14}$$
Balance de energía: $$\frac{dT}{dW} = \frac{\frac{U_a}{\rho_a}(T_a - T) + r'_A \Delta H_{RX}(T)}{F_{ao}(\sum \Theta_i C_p + \Delta C_p X)}$$

5. 7. 1 Parámetros para solucionar modelo matemático de reactor

Dentro de los parámetros necesarios para resolver las ecuaciones anteriores, se debe tener en cuenta, que para calcular el coeficiente global de calor U_a se usan los parámetros que se encuentran en la sección 5.4.1. Parámetros para solucionar modelo de intercambiador de calor.

ρ_b es la densidad de bulto, esta dado por:

$$\rho_b = \frac{r_a}{r'_a} \quad (30)$$

$r_a = Vel.\,de\ reaccion\ en\ funcion\ del\ volumen\ del\ reactor$

$r'_a = Vel.\,de\ reaccion\ en\ funcion\ de\ la\ masa\ del\ catalizador$

La velocidad de reacción, se expresa en la ecuación (27), con parámetro de la ecuación de arrhenius, ecuación (28) es decir, está en función de la temperatura.

El calor de reacción ΔH_{RX} está dado por la siguiente ecuación:

$$\Delta H_{Rx}(T) = \frac{d}{a} H_D(T) + \frac{c}{a} H_C(T) - \frac{b}{a} H_B(T) - H_A(T) \quad (31)$$

θ_i se define como, moles i/moles a. y Cp la capacidad calorífica que la describe la ecuación:

$$\Delta Cp = \frac{d}{a} Cp_D + \frac{c}{a} Cp_C - \frac{b}{a} Cp_B - Cp_A \quad (32)$$

Tabla 16. Resumen ecuaciones modelo matemático reactor

MODELO MATEMATICO	PARAMETROS
Balance de materia: $$F_{A0}\frac{dX}{dW} = -r'_A$$ Balance de energía: $$\frac{dT}{dW} = \frac{\frac{U_a}{\rho_a}(T_a - T) + r'_A \Delta H_{RX}(T)}{F_{ao}(\sum \Theta_i C_p + \Delta C_p X)}$$	• $\rho_b = \frac{r_a}{r'_a}$ • $r'_A = K[NH_3]^{0.36}[O_2]^{0.14}$ • $K[NH_3]^{0.36}[O_2]^{0.14} = -F_{AO}\frac{dX}{dW}$ • $K = A \cdot e^{\frac{-Ea}{RT}}$ • $\Delta H_{Rx}(T) = \frac{d}{a}H_D(T) + \frac{c}{a}H_C(T) - \frac{b}{a}H_B(T) - H_A(T)$ • $\Delta Cp = \frac{d}{a}Cp_D + \frac{c}{a}Cp_C - \frac{b}{a}Cp_B - Cp_A$ • $\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{1}{h_c}$ • $h_f = \frac{Nu_f k_f}{L} \quad h_c = \frac{Nu_c k_c}{L}$ • $Nu = 0.023 \mathrm{Re}_D^{4/5} \mathrm{Pr}^n$ • $\mathrm{Re}_D = \frac{G_T D}{\mu}$ • $\mathrm{Pr} = \frac{C_P \mu}{k}$ • $\mu = \mu_{mezcla} = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i \mu_i}{\sum_{i=1}^{n} x_j \varphi_{ij}}$ • $\varphi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}}\left(1 + \frac{M_i}{M_j}\right)^{-1/2}\left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{1/2}\left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{1/2}\right]^2$ • $C_{p_{mezcla}} = y_A C_{p_A} + y_B C_{p_B} + y_C C_{p_C}$

DATOS DE ENTRADA		
NAN - 1	NAN - 2	NAN - 3
• Flujo másico (lb/hr)= 106505.4 Agua=1051.2 lb/hr NH3=6687.8 lb/hr O2= 22908.8 lb/hr	• Flujo másico (lb/hr)= 163608 Agua=1755 lb/hr NH3=9671 lb/hr O2= 35446 lb/hr	• Flujo másico (lb/hr)= 119656 Agua=1041 lb/hr NH3=7381 lb/hr O2= 25908 lb/hr

N2= 75857.6 lb/hr • Temp. (°F) = 550 • Presión (PSIG) = 120	N2= 116736 lb/hr • Temp. (°F) = 550 • Presión (PSIG) = 120	N2= 85326 lb/hr • Temp. (°F) = 548 • Presión (PSIG) = 115.5

5.8 Modelo matemático Torres de absorción

Para las Torres de absorción que se encuentran en NAN1, NAN2, NAN3, se tienen las siguientes características:

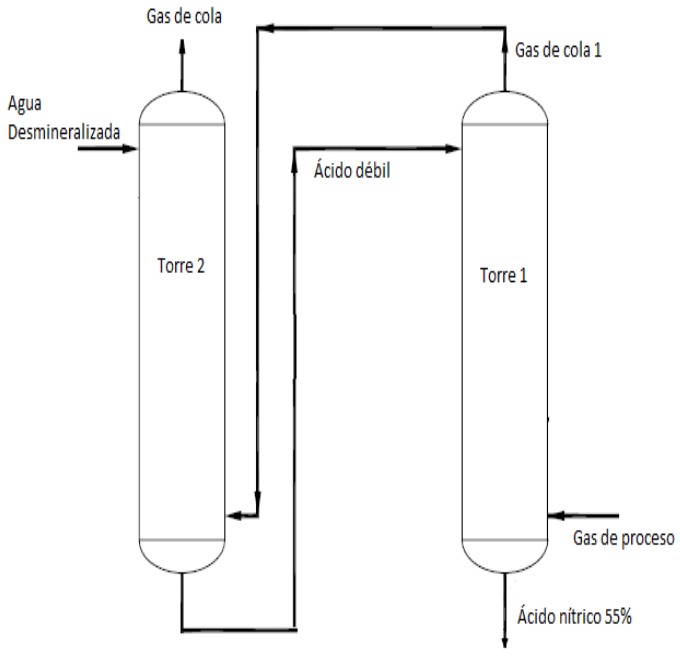
Tabla 17. Características físicas de las Torres de absorción de las plantas de acido nítrico de ABOCOL S.A.

Planta	Tipo de Torre	Material	Dimensiones		Tipo de Torre
NAN1	Absorción	acero inoxidable 340 L	48 ft 24 ft 11 ft	Altura Altura Diámetro interno	Capucha con enfriamiento
NAN2	Absorción	acero inoxidable 340 L	48 ft 11 ft	Altura Diámetro interno	
NAN3	Absorción	acero inoxidable 340 L	48 ft 24 ft 11 ft	Altura Altura Diámetro interno	

Para la realización del siguiente modelado matemático, se debe tener en cuenta que el proceso se considera en estado estable, ya que opera por largos periodos sin cambios en sus condiciones de operación. Por tanto no hay alteración de las variables respecto al tiempo. Además el gasto de masa de cada fluido permanece constante y las propiedades de los fluidos siguen siendo las mismas.

La realización de los cálculos se realiza plato a plato, para el desarrollo del modelo general de toda la torre. Debemos tener en cuenta que en la planta NAN2 solo hay una torre de 35 platos, mientras que en las otras dos plantas hay dos torres, una de 35 platos y la otra 49, en cada una. La producción total de ácido se toma en el plato 1, en el cual es donde se encuentra la mayor concentración del producto deseado. En la figura 9 se esquematizan las torres con sus corrientes de entrada y salida.

a)



TORRE 1

Corrientes gaseosas

$$\begin{cases} Entrada\ Inferior: \text{GAS DE PROCESO} \\ Salida\ Superior: \text{GAS DE COLA 1} \end{cases}$$

Corrientes líquidas:

$$\begin{cases} Entrada\ Superior: \text{ÁCIDO DEBIL} \\ Salida\ Inferior: \text{ÁCIDO FUERTE} \end{cases}$$

TORRE 2

Corrientes gaseosas

$$\begin{cases} Entrada\ Inferior: \text{GAS DE COLA 1} \\ Salida\ Superior: GAS\ DE\ COLA \end{cases}$$

Corrientes líquidas:

$$\begin{cases} Entrada\ Superior: \text{ÁGUA DESMIN.} \\ Salida\ Inferior: \text{ÁCIDO DÉBIL} \end{cases}$$

b)

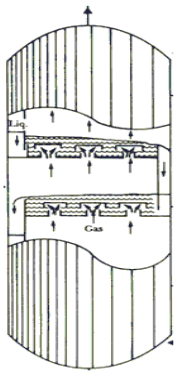


Figura 9. a) Esquema torres de absorción con corrientes de entrada y salida; b) Diagrama de flujo de gas de proceso (asciende) y ácido débil por plato (desciende). (Fremantle, M., *Chemistry in Action*, MacMillan, Londres, 1987)

A continuación se muestra una secuencia de pasos para llevar a cabo la simulación de una torre de absorción:

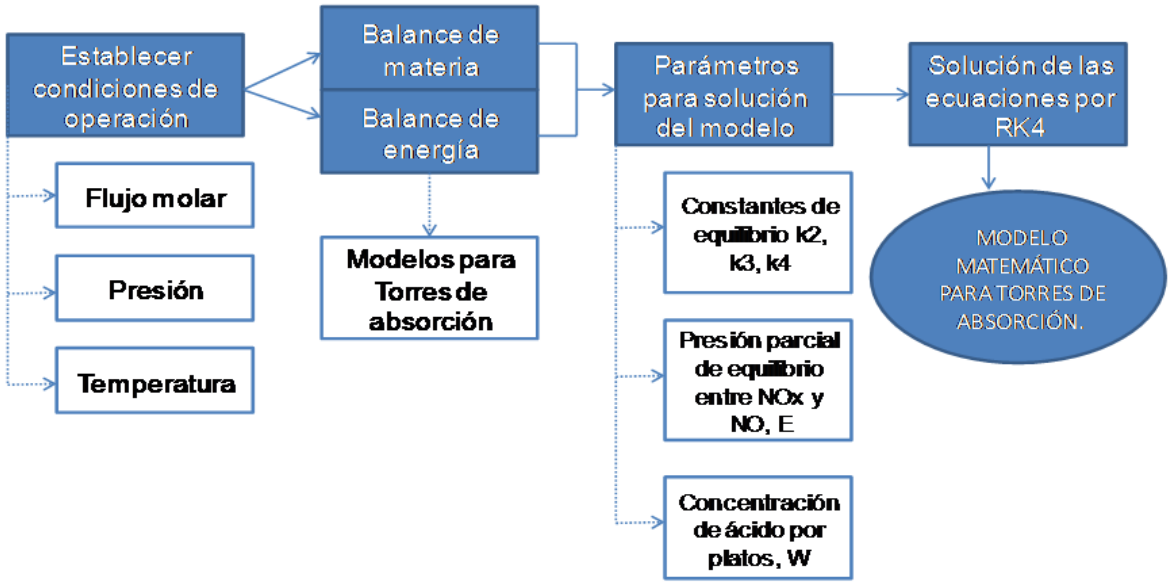


Figura 10. Algoritmo para llevar a cabo la simulación de Torres de absorción.

En la torre de absorción, los gases de cola entran por el fondo de esta, mientras el ácido de baja concentración (ácido débil) entra por la cima. La temperatura dentro de la torre es menor en la cima, y esta va incrementando hacia el fondo (aumento en dirección axial). La razón por la que esta aumenta es que a medida que se va acercando el flujo hacia el fondo, la formación de ácido es mayor, y al ser esta reacción exotérmica la formación de calor es mayor y por ende aumenta la temperatura, agregándole a esto que por el fondo entra la corriente de gas de proceso a una alta temperatura. Para evitar que se provoque un desequilibrio en la formación de ácido a la concentración deseada (55%), cada plato tiene un sistema de refrigeración tipo serpentín, para controlar la temperatura en toda la torre. Se tienen los flujos molares de NOx como variables independientes, mientras que la temperatura y la formación de ácido plato a plato son las variables de estado de interés.

En las torres de absorción, se realiza un análisis de incremento de temperatura y un balance molar de formación de ácido nítrico mediante las siguientes ecuaciones:

$$\Delta T = \frac{\left[\left(6.2*10^{3}.G_{NO}\right)+2.845*10^{4}\left(G'_{N_2O_4}-G_{N_2O_4}\right)\right]}{G_{gas}C_{gas}} \quad (33)$$

ΔT en la ecuación significa el incremento de temperatura en el gas en kelvin (K), G_{NO} es el flujo molar de NO en gas de alimentación en kmol/s, G'_{N2O4} es el flujo molar de N_2O_4 después de la oxidación en kmol/s, mientras que G_{N2O4} representa el flujo molar de N_2O_4 antes de la oxidación en kmol/s. G_{gas} es el caudal molar de la mezcla total del gas en kmol/s.

$$Fa = \left[p_{NO} + p_{NOx} - \frac{k_3 E^3 + 2E^2}{k_2 + E} \right] \frac{(G_{NO} + G_{NOx}).C_p}{(p_{No} + p_{NOx})} \quad (34)$$

Donde F_a representa las moles de acido formado, p_{NO} es la presión parcial de NO, mientras que p_{NOX} es la presión parcial de NO_2 + N_2O_4. k_2 es la constante de equilibrio NO_2/N_2O_4, llamada constante de Bodenstein, k_3 es la relación k_4/k_2 y k_4 es otra constante de equilibrio NO/N_2O_4, C_p es la capacidad calorífica promedio de la mezcla, mientras que E es la presión parcial de equilibrio de NO_2, la cual se halla mediante una ecuación descrita en el ítem 5.5.1 [23]

Las ecuaciones que representan el modelo matemático para las torres de absorción presentes en las plantas de ácido nítrico:

Tabla 18. Modelo matemático Torres de absorción

Ecuación de incremento de Temperatura
$\Delta T = \frac{\left[\left(6.2*10^3.G_{NO}\right) + 2.845*10^4\left(G'_{N_2O_4} - G_{N_2O_4}\right)\right]}{G_{gas}C_{gas}}$
Balance molar de formación de ácido
$Fa = \left[p_{NO} + p_{NOx} - \frac{k_3 E^3 + 2E^2}{k_2 + E} \right] \frac{(G_{NO} + G_{NOx}).Cp}{(p_{No} + p_{NOx})}$

5. 8. 1 Parámetros para solucionar modelo matemático de torres de absorción

Para resolver las ecuaciones que modelan el comportamiento en las torres, es necesario hallar las constantes de equilibrio de k_2, k_3 y k_4, y la presión parcial de equilibrio, E, además de seguir las etapas para el desarrollo del modelo. Las siguientes ecuaciones representan cada uno de las variables mencionadas:

$$\log k_4 = 7.412 - 20.2892W + 32.47322W^2 - 30.87W^3 \quad (35)$$

Donde W es la concentración de acido presente en el plato, y E es la presión parcial de equilibrio de NO_2, determinada por:

$$3k_3E^3 + \frac{2E^2}{k_2} + E = 3p_{NO} + p_{NOx} \quad (36)$$

El algoritmo para desarrollar el modelo matemático para una torre de absorción se describe a continuación:

Etapa 1: El gas de proceso de composición conocida entra a la torre a una temperatura (°F) y presión (psig) dada.

Etapa 2: Un poco de oxidación del NO se da en un espacio vacío antes del primer plato. El grado de oxidación es determinado usando la ecuación de Bodenstein[22]

$$k_1tP^2 = (b-a)^{-2}\left\{\left[X(b-a)/b.(1-X)\right] - Ln\left[(1-X)/\left(1-\frac{aX}{k_1}\right)\right]\right\} \quad (37)$$

Donde k_1 es la constante de velocidad, obtenida mediante:

$$\log k_1 = \left(\frac{635}{T} - 1.0261\right) \quad (38)$$

t es el tiempo de residencia en el espacio de oxidación, en segundos, P es la presión de operación, en bar, b es la fracción molar inicial de O_2 en el gas, 2a es la fracción molar inicial de NO en el gas, X es la fracción de NO oxidado adicionalmente, y T es la temperatura del gas, en K.

Etapa 3: La composición del gas de proceso es recalculada basada en la oxidación de NO a NO_2

Etapa 4: Se calcula la constante de equilibrio de la reacción:

$$NO_2 \xrightarrow{k_2} \xleftarrow{} N_2O_4$$

$$k_2 = \frac{p_{NO_2}^2}{p_{N_2O_4}} = 10^{\left(8.756 - \frac{2838}{T}\right)}\left[1 - \left(\frac{T}{210.3} + \frac{790}{T} - 3.8794\right).p_{NOx}\right] \quad (39)$$

Etapa 5: La composición del gas es revisada de nuevo. El incremento en la temperatura es calculado de acuerdo con el cambio en la relación NO_2/N_2O_4 y de acuerdo con la oxidación de NO. Ambas reacciones son exotérmicas.

El incremento en la temperatura del gas esta dado por la ecuación (33), por lo tanto la temperatura y composición de entrada al primer plato son conocidas.

Etapa 6: El número de moles de HNO_3 formados cuando el gas pasa a través de la mezcla liquida en el plato, es calculado. Este cálculo incluye un término que describe efectivamente la eficiencia del plato. Las moles de acido formado están dado por la ecuación (34).

Etapa 7: El balance molar por componentes es recalculado de acuerdo con las moles de acido nítrico formado. La técnica de evaluación (etapa 3) para el balance de equilibrio de NO_2 y el N_2O_4, es usada de nuevo. Las concentraciones de los gases calculadas después de la formación de HNO_3 son también usadas como los valores de composición de entrada al siguiente plato.

Etapa 8: conociendo el numero de moles de acido formado por reacción química/absorción, las moles de acido y agua requerida por el siguiente plato pueden ser calculados y por tanto la concentración es determinada.

Etapa 9: Un balance de energía plato por plato también es posible. Los factores considerados son el calor de reacción de la oxidación de NO, el calor de reacción por cualquier cambio en el equilibrio NO_2/N_2O_4, el calor del flujo de la solución de acido débil del plato anterior al siguiente y el calor sensible para enfriar los dos, la reacción de gases y la solución de acido pasando a través de cada plato. Este balance de calor nos da la refrigeración requerida en cada plato. Se usa una simple derivación de la ecuación.

Etapa 10: Los cálculos siguen hasta completar el numero de platos, lo que conlleva a regresar a la etapa 2 mediante la cual la fracción de NO oxidada en el espacio vacío por encima del plato es recalculada. Los pasos siguen de la etapa 2 a la 10.[23]

Tabla 19. Resumen ecuaciones modelo matemático Torre de Absorción.

MODELO MATEMATICO	PARAMETROS
Ecuación de incremento de Temperatura $\Delta T = \frac{\left[\left(6.2*10^3.G_{NO}\right)+2.845*10^4\left(G'_{N_2O_4}-G_{N_2O_4}\right)\right]}{G_{gas}C_{gas}}$ Balance molar de formación de ácido $Fa=\left[p_{NO}+p_{NOx}-\frac{k_3E^3+2E^2}{k_2+E}\right]\frac{(G_{NO}+G_{NOx}).C}{(p_{No}+p_{NOx})}$	• $\log k_4 = 7.412 - 20.2892\cdot W + 32.47322\cdot$ $-30.87\cdot W^3$ $3k_3E^3+\frac{2E^2}{k_2}+E=3p_{NO}+p_{NOx}$ • $k_1tP^2=(b-a)^{-2}\left\{\left[X(b-a)/b.(1-X)\right]-Ln\left[(1-X)/\left(1-\frac{aX}{k_1}\right.\right.\right.$ • $\log k_1=\left(\frac{635}{T}-1.0261\right)$ • $k_2=\frac{p^2_{NO_2}}{p_{N_2O_4}}=10^{\left(8.756-\frac{2838}{T}\right)}\left[1-\left(\frac{T}{210.3}+\frac{790}{T}-3.879\right.\right.$

DATOS DE ENTRADA		
NAN – 1	NAN - 2	NAN - 3
• Flujo másico (lb/hr)= 106505.4 O_2= 4976 lb/hr N_2= 76129.2 lb/hr NO= 6468 lb/hr NO_2= 7268 lb/hr HNO_3= 88.2 lb/hr H_2O= 11664 lb/hr • Temperatura (°F) = 110	• Flujo másico (lb/hr)= 163608 O_2= 4771 lb/hr N_2= 117373 lb/hr NO= 2920.99 lb/hr NO_2= 11909.01 lb/hr HNO_3= 149 lb/hr H_2O= 14786 lb/hr • Temperatura (°F) = 116	• Flujo másico (lb/hr)= 119656 O_2= 2079.9 lb/hr N_2= 84770.02 lb/hr NO= 1308.3 lb/hr NO_2= 5334 lb/hr HNO_3= 87 lb/hr H_2O= 12153 lb/hr • Temperatura (°F) = 112.7

5.9 Modelo matemático de turbina

Las turbinas que se encuentran en las tres plantas de ácido nítrico de ABOCOL S.A. tienen las siguientes características:

Tabla 20. Características físicas de las turbinas de las plantas de acido nítrico de ABOCOL S.A.

Planta	Tipo de Turbina	Material
NAN1	Vapor a vacio	Acero al carbón
NAN2	Vapor a vacio	Acero al carbón
NAN3	Vapor a vacio	Acero al carbón

Para el modelo matemático de la turbina, que se considera en estado estable, se considera que el fluido pasa y este le entrega su energía a través de rodetes con álabes. Se transforma energía de una corriente de gas en energía mecánica, por medio de la fuerza tangencial producida por el impulso generado por el movimiento de la rueda. Esta energía mecánica se transfiere a través de un eje para proporcionar el movimiento de un compresor.

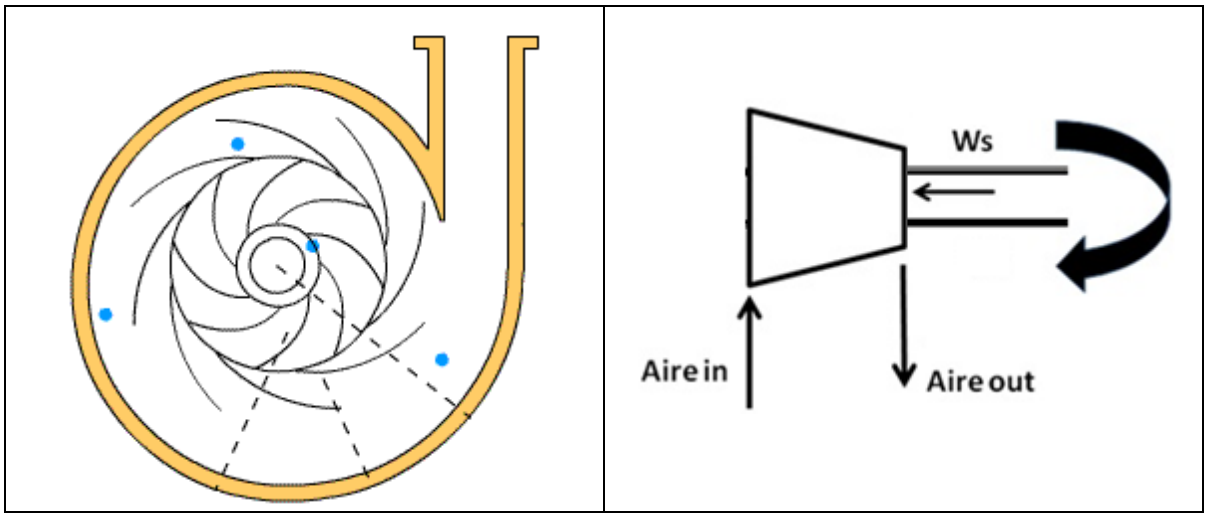


Figura 11. Esquema de Turbina

La siguiente secuencia de pasos, permite obtener el modelo matemático de las calderas, tal como se muestra a continuación.

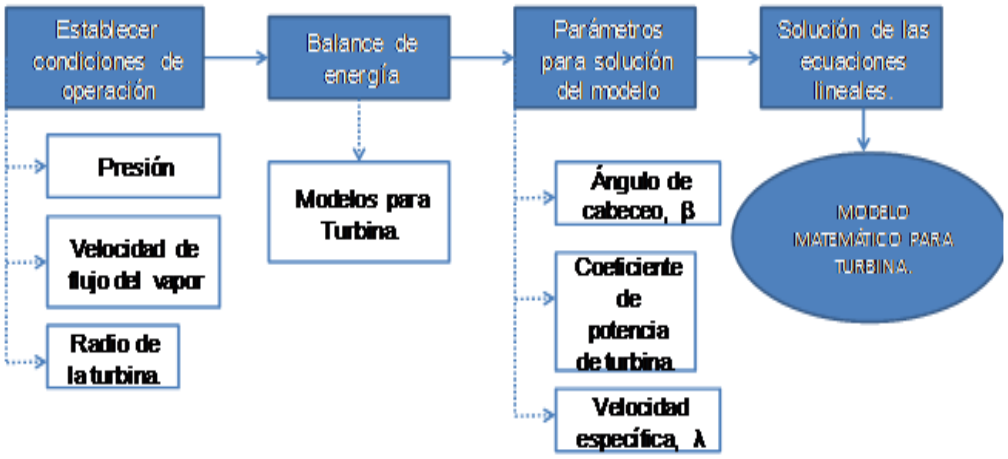


Figura 12. Algoritmo para llevar a cabo simulación de turbina.

Debido a que los acoplamientos entre la turbina, la caja multiplicadora y el compresor se consideran rígidos el momento de inercia de los tres componentes se considera como uno solo.

La siguiente ecuación representa el modelo en régimen estacionario de la potencia generada por la turbina [24]:

$$P_T = cp(\lambda, \beta)\frac{\rho \pi R^2}{2} v^3 \quad (40)$$

Siendo P_T potencia mecánica de salida de la turbina (W); cp: coeficiente de potencia de la turbina; ρ densidad del aire (kg/m^3); R^2 radio de la turbina que multiplicado por pi forma el área de barrido (m^2) es decir área que abarcan las palas del rotor; v velocidad del viento (m/s); β ángulo de cabeceo, ángulo de giro de las palas; λ velocidad especifica. [24]

Tabla 21. Modelo matemático Turbina

Potencia Turbina
$P_T = cp(\lambda,\beta)\frac{\rho\pi R^2}{2}v^3$

5. 5. 1Parámetros para solucionar modelo matemático de turbina

Coeficiente de potencia se obtiene en función de la velocidad específica y el ángulo de cabeceo. Se modela como[25]:

$$cp(\lambda,\beta) = c_1(\frac{c_2}{\lambda_i} - c_3\beta - c_4)e^{-c_6}\lambda_i + c_6\lambda \quad (41)$$

Siendo la velocidad especifica la relación de proporción entre la velocidad de la turbina w_T y la velocidad del viento v.

$$\lambda = \frac{w_t R}{v} \quad (42)$$

La expresión del coeficiente de potencia está basada en la distribución de weibull, que es una distribución de probabilidad, el cálculo se hace mediante la siguiente grafica:

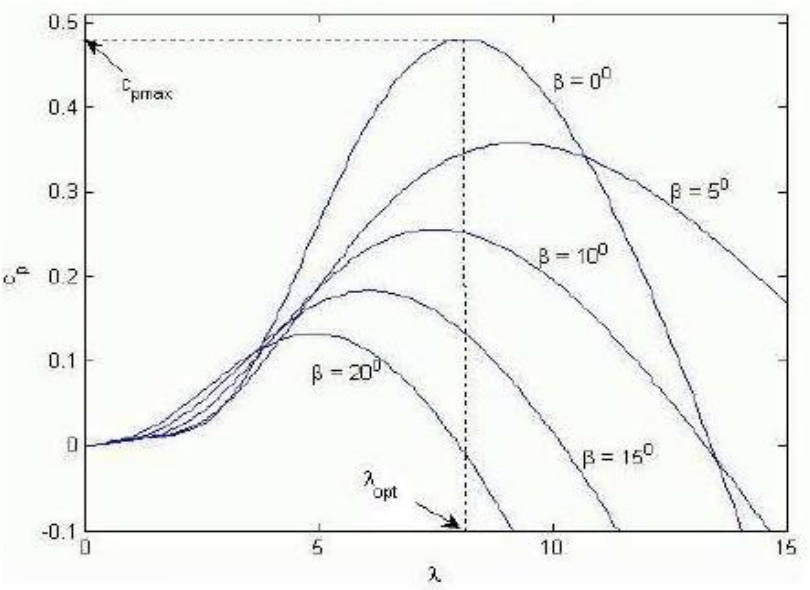


Figura 13. Distribución de Cp en función de λ y β

Tabla 22. Resumen ecuaciones modelo matemático turbina.

MODELO MATEMÁTICO	PARÁMETROS
$P_T = cp(\lambda,\beta)\frac{\rho\pi R^2}{2}v^3$	• $cp(\lambda,\beta) = c_1(\frac{c_2}{\lambda_i} - c_3\beta - c_4)e^{-c_6}\lambda_i + c_6\lambda$ • $\lambda = \frac{w_t R}{v}$

DATOS DE ENTRADA		
NAN-1	NAN-2	NAN-3
Flujo de cola: 101723 lb/h Temperatura: 925° F	Flujo de cola: 153888 lb/h Temperatura: 1100° F	Flujo de cola: 112238 lb/h Temperatura: 1030° F

5. 10 Modelo matemático compresor

Para los compresores que se encuentran en NAN1, NAN2, NAN3 se tienen las siguientes características:

Tabla 23. Características físicas de los compresores de las plantas de acido nítrico de ABOCOL S.A.

Planta	Tipo de compresor	Material
NAN1	Centrífugo	acero al carbón
NAN2	Centrífugo	acero al carbón
NAN3	Centrífugo	acero al carbón

Para la realización del siguiente modelado matemático, se debe tener en cuenta que el proceso se considera en estado estable, ya que opera por largos periodos sin cambios en sus condiciones de operación. Por tanto no hay alteración de las variables respecto al tiempo. Además el gasto de masa de cada fluido permanece constante y las propiedades de los fluidos siguen siendo las mismas. Para una mejor modelación del compresor, se asume que es un proceso isentrópico.

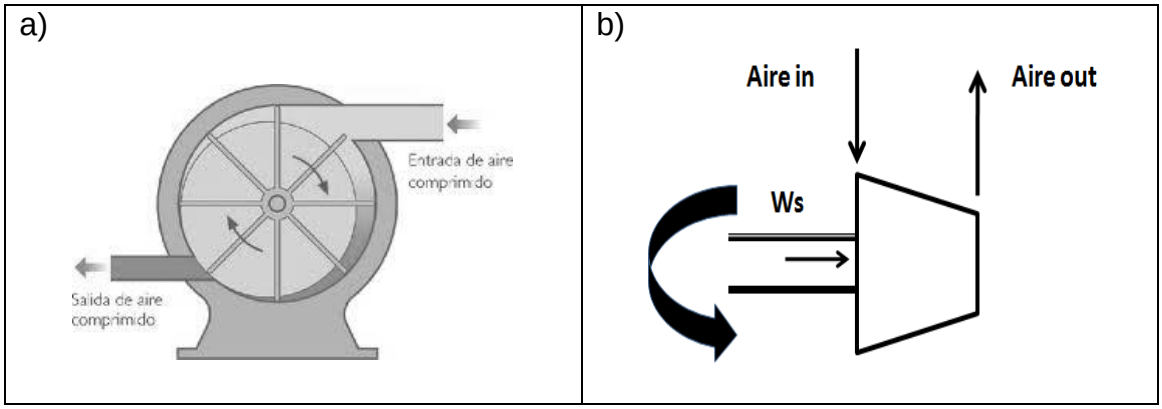


Figura 14. a) Esquema de un compresor. b) Diagrama de flujo de materia y energía en compresor.

Una forma de realizar un modelo matemático, es siguiendo una secuencia de pasos, que permitan alcanzar los objetivos propuestos, tal como se muestra a continuación.

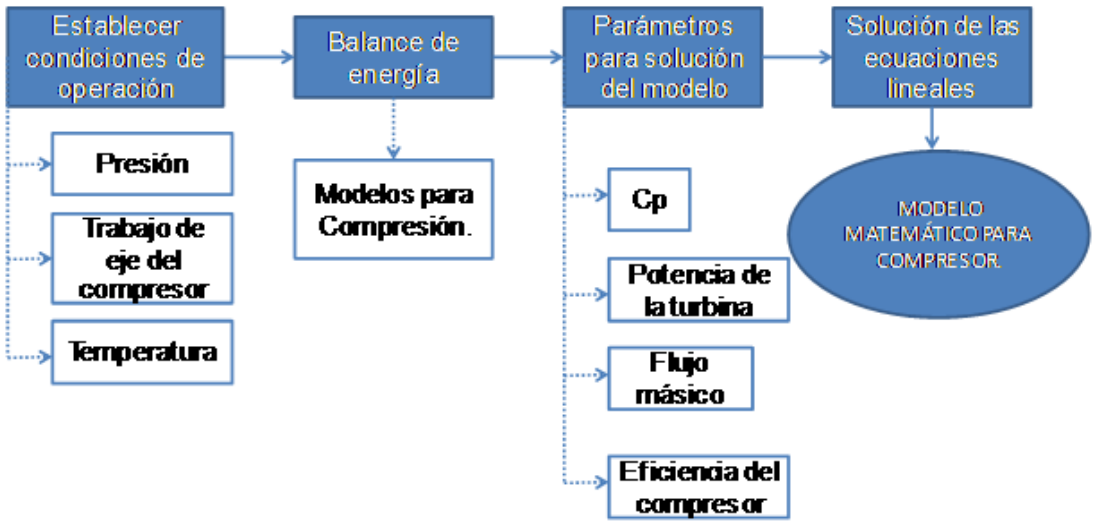


Figura 15. Algoritmo para llevar a cabo la simulación del compresor.

Para el modelado del compresor, se tiene en cuenta que trabaja en estado estable. La potencia del compresor es dependiente de la potencia generada por una turbina. El compresor centrífugo consiste en un rotor que gira dentro de una carcasa provista de aberturas para la entrada y salida del aire. El rotor convierte la energía mecánica del eje en cantidad de movimiento y por tanto energía cinética del aire, lo que aumenta la presión del mismo. La presión alcanzada por el aire en el compresor es suficiente para el gas a lo largo del resto del proceso.

El trabajo producido por el compresor esta dado por la ecuación [26]:

$$-Ws = Z\frac{RkT_1}{M(k-1)}\left[\left(\frac{P_2}{P_1}\right)^{\frac{k-1}{k}} - 1\right] \tag{43}$$

donde Z es el factor de compresión del gas; R es el radio del compresor; k es el coeficiente isentropico; M es el flujo másico; P_2 es la presión de salida; P_1 es la presión de entrada. El coeficiente isentrópico, k, está definido por la siguiente ecuación:

$$k = \frac{C_p}{C_v} \tag{44}$$

Donde C_p y C_v son las capacidades caloríficas a presión y volumen constante, respectivamente. Para hallar el trabajo real del compresor, tenemos la ecuación (45), donde η_s es la eficiencia del compresor:

$$-Wa = Ws/\eta s \quad (45)$$

Tabla 24. Modelo matemático compresor.

Trabajo compresor

$$-Ws = Z\frac{RkT_1}{M(k-1)}\left[\left(\frac{P_2}{P_1}\right)^{\frac{k-1}{k}} - 1\right]$$

Tabla 25. Resumen ecuaciones modelo matemático compresor.

MODELO MATEMÁTICO	PARÁMETROS
$-Ws = Z\frac{RkT_1}{M(k-1)}\left[\left(\frac{P_2}{P_1}\right)^{\frac{k-1}{k}} - 1\right]$	• $k = \frac{C_p}{C_v}$ • $-Wa = Ws/\eta s$

DATOS DE ENTRADA		
NAN-1	NAN-2	NAN-3
Flujo de entrada: 99817.6 lb/h Temperatura: 90° F	Flujo de entrada: 153888 lb/h Temperatura: 90° F	Flujo de entrada: 112238 lb/h Temperatura: 90° F

5. 11 Modelo matemático para filtros

Para los filtros que se encuentran en NAN1, NAN2, NAN3, se tienen las siguientes características:

Tabla 26. Características físicas de los filtros de las plantas de ácido nítrico de ABOCOL S.A.

Planta	Tipo de Filtro	Material (medio filtrante)	Dimensiones	
NAN1	Filtro de Aire	Acero al carbón (lana de vidrio)	13.12 ft 4.725 ft 4.645 ft	Altura Diámetro Out Diámetro In
NAN1	Filtro de Amoníaco	acero inoxidable 304 y al carbón (lana de vidrio)	3.3 ft 1 ft 0.8 ft	Altura Diámetro Out Diámetro IN
NAN1	Filtro de Platino	acero inoxidable 304 (fibra cerámica)	12 ft 2.2 ft 2.188 ft	Altura Diámetro Out Diámetro In
NAN2	Filtro de Aire	Acero al carbón (lana de vidrio)	13.12 ft 4.725 4.645	Altura Diámetro Out Diámetro In
NAN2	Filtro de Amoníaco	acero inoxidable 304 y al carbón (lana de vidrio)	3.3 ft 1 ft 0.8 ft	Altura Diámetro Out Diámetro In
NAN2	Filtro de Platino	acero inoxidable 304 (fibra cerámica)	12 ft 2.2 ft 2.188 ft	Altura Diámetro Out Diámetro In
NAN3	Filtro de Aire	Acero al carbón (lana de vidrio)	13.12 ft 4.725 4.645	Altura Diámetro Out Diámetro In
NAN3	Filtro de Amoníaco	acero inoxidable 304 y al carbón (lana de vidrio)	3.3 ft 1 ft 0.8 ft	Altura Diámetro Out Diámetro In
NAN3	Filtro de Platino	acero inoxidable 304 (fibra cerámica)	12 ft 2.2 ft 2.188 ft	Altura Diámetro Out Diámetro In

Para la realización del siguiente modelado matemático, se debe tener en cuenta que el proceso se considera en estado estable, ya que opera por largos periodos

sin cambios en sus condiciones de operación. Por tanto no hay alteración de las variables respecto al tiempo. Además el gasto de masa de cada fluido permanece constante y las propiedades de los fluidos siguen siendo las mismas.
Se toma el volumen total, para el desarrollo del modelo.

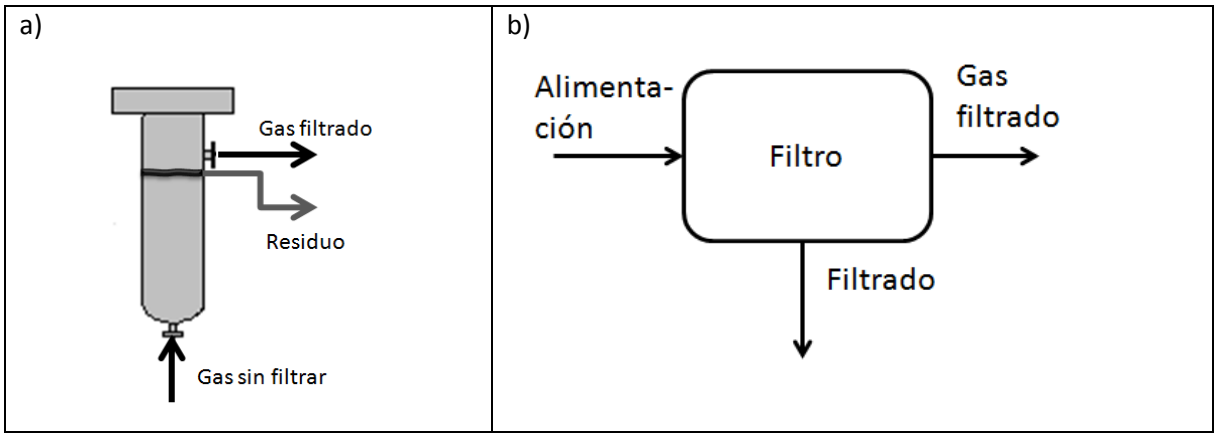


Figura 16. a) Esquema filtro gas-sólido. b) Diagrama de flujo del filtro para el balance

Una forma de realizar un modelo matemático, es siguiendo una secuencia de pasos, que permitan alcanzar los objetivos propuestos, tal como se muestra a continuación.

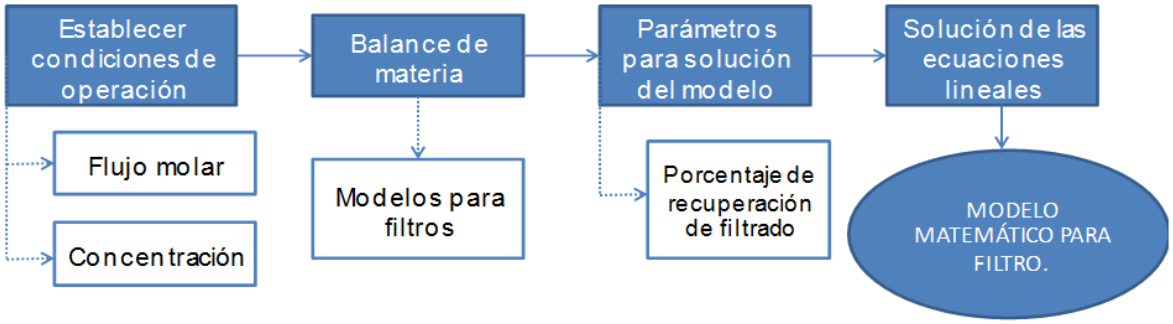


Figura 17. Algoritmo para llevar a cabo la simulación de un filtro.

Considerando el filtro mostrado en la Figura 16, El flujo de gas entra por el fondo de este, saliendo el gas filtrado por la parte superior, disminuyendo la concentración de los sólidos inertes (impurezas o platino, dependiendo del filtro). La concentración de inertes varía en el punto exacto donde se encuentra el material filtrante. [27]

Siguiendo el algoritmo planteado para el modelado de filtro, se necesita el balance de materia para la caracterización de la recuperación del residuo.

$$\begin{bmatrix} Entrada \text{ de materia (gas)} \\ \text{al sistema desde} \\ \text{los alrededores} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} Salida \text{ de materia (gas)} \\ \text{del sistema hacia} \\ \text{los alrededores} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} Acumulación \text{ de} \\ \text{material filtrado} \\ \text{dentro del sistema} \end{bmatrix} = 0 \quad (46)$$

Por lo tanto:

$$F_{in} - F_{out} - F_{filtrado} = 0 \quad (47)$$

Donde F_{in} es el flujo másico de entrada del gas con las partículas a filtrar; F_{out} es la másico de salida de gas con una cantidad de mínima de filtrado (tendiente a cero); y $F_{filtrado}$ es el flujo másico que sale de residuo filtrado. El término $F_{filtrado}$ puede ser hallado mediante la siguiente ecuación:

$$\mathrm{F}_{\text{filtrado}} = X.(F_{in}) \quad (48)$$

Los flujos F_{in} y X (fracción másica de inerte) son datos suministrado por ABOCOL S.A., que permiten hallar $F_{filtrado}$ y F_{out} mediante las ecuaciones anteriormente descritas (46 y 47), asumiendo que la remoción de los filtros es total, por lo tanto, para hallar la remoción real, se debe multiplicar el $F_{filtrado}$ por un valor X_{rr} denominado fracción real de remoción, dato que oscila entre 0.97 y 0.99 (Dato suministrado por ABOCOL S.A.), por lo tanto las ecuaciones para $F_{filtrado}$ y F_{out} quedarían:

$$\mathrm{F}_{\text{filtrado.real}} = F_{filtrado}(X_{rr}) = X(F_{in})(X_{rr}) \quad (49)$$

$$F_{out.real} = F_{out} + (F_{filtrado} - F_{filtrado.real}) \quad (50)$$

Tabla 27. Modelo matemático para Filtros.

Balance de materia:
$\mathrm{F}_{\text{in}} - F_{out-real} = X(F_{in})(X_{rr})$

Tabla 28. Resumen ecuaciones modelo matemático para Filtros.

<table>
<tr><td>MODELO MATEMÁTICO</td><td colspan="3">PARÁMETROS</td></tr>
<tr><td>$F_{in} - F_{out} = (1 - X)(F_{in})$</td><td colspan="3">• $F_{filtrado.real} = F_{filtrado}(X_{rr}) = X(F_{in})(X_{rr})$
• $F_{out.real} = F_{out} + (F_{filtrado} - F_{filtradoreal})$</td></tr>
<tr><td colspan="4">DATOS DE ENTRADA</td></tr>
<tr><td colspan="4">NAN-1</td></tr>
<tr><td>Filtro de aire</td><td colspan="2">Filtro de Amoniaco</td><td>Filtro de Platino</td></tr>
<tr><td>• Flujo de entrada: 103388 lb/h
• Concentración de partículas: 0.00561
• % de remoción: 98%</td><td colspan="2">• Flujo de entrada: 6739 lb/h
• Concentración de partículas: 0.0045
• % de remoción: 99%</td><td>• Flujo de entrada: 95250 lb/h
• Concentración de partículas: 0.0063
• % de remoción: 98%</td></tr>
<tr><td colspan="4">NAN-2</td></tr>
<tr><td>Filtro de aire</td><td colspan="2">Filtro de Amoniaco</td><td>Filtro de Platino</td></tr>
<tr><td>• Flujo de entrada: 157242 lb/h
• Concentración de partículas: 0.00561
• % de remoción: 98%</td><td colspan="2">• Flujo de entrada: 9768 lb/h
• Concentración de partículas: 0.00561
• % de remoción: 99%</td><td>• Flujo de entrada: 165990 lb/h
• Concentración de partículas: 0.00561
• % de remoción: 98%</td></tr>
<tr><td colspan="4">NAN-3</td></tr>
<tr><td>Filtro de aire</td><td colspan="2">Filtro de Amoniaco</td><td>Filtro de Platino</td></tr>
<tr><td>• Flujo de entrada: 115458 lb/h
• Concentración de partículas: 0.00561
• % de remoción: 98%</td><td colspan="2">• Flujo de entrada: 7556 lb/h
• Concentración de partículas: 0.00561
• % de remoción: 99%</td><td>• Flujo de entrada: 121450 lb/h
• Concentración de partículas: 0.00561
• % de remoción: 98%</td></tr>
</table>

6. RESULTADOS y DISCUSIÓN

Intercambiador de calor

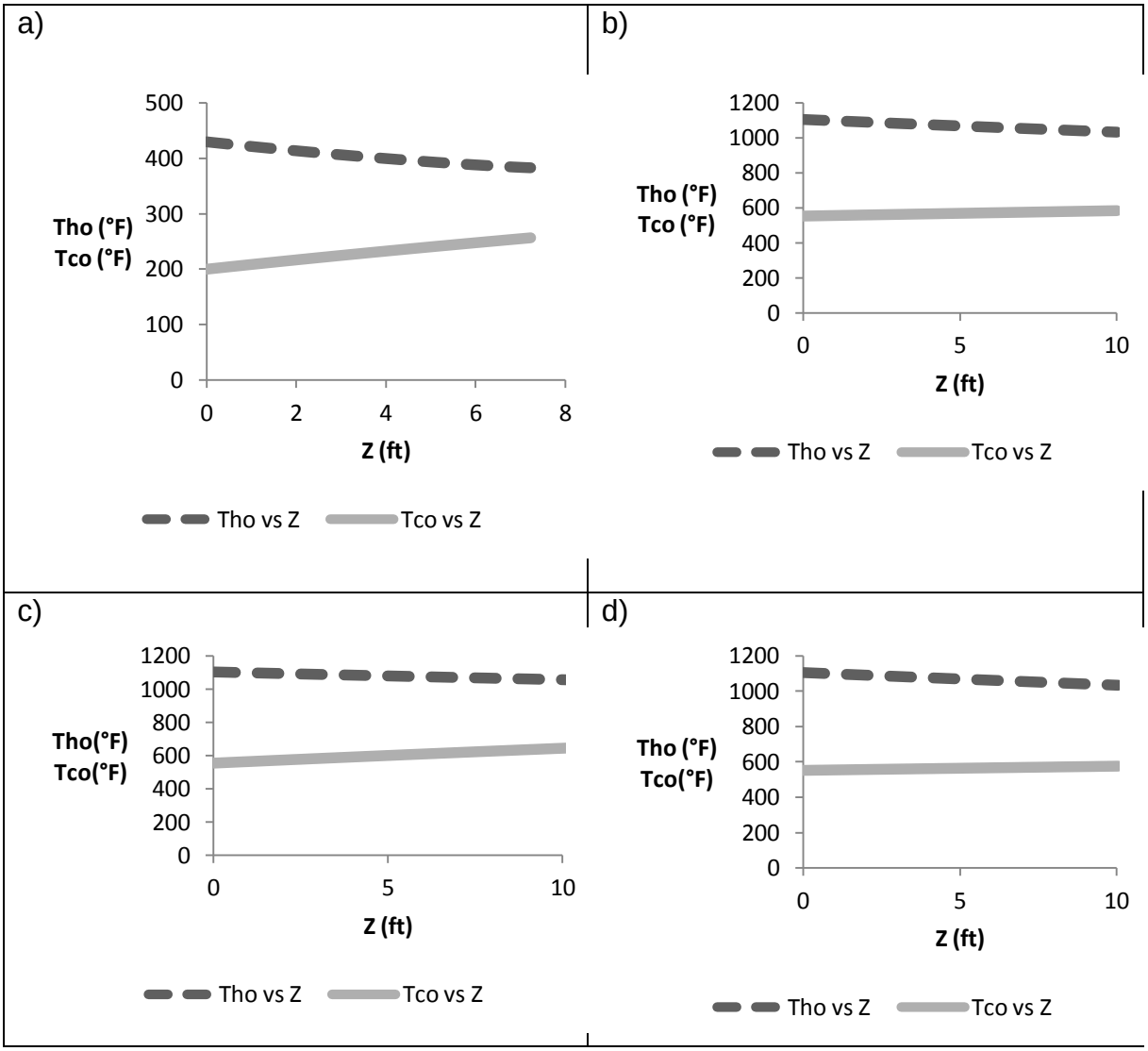


Figura 18. Intercambiadores de calor a) E-802, b) E-815, c) NAN-1, d) ME-0150

La fase de transferencia y aprovechamiento de calor es muy importante en el proceso de producción de acido nítrico, ya que, se debe alcanzar una baja temperatura antes de la torre para que la absorción se dé. En los intercambiadores de calor de estas plantas, el gas de proceso pasa a través de los tubos y el fluido refrigerante por la coraza.

En los resultados se puede ver el comportamiento de la temperatura en los equipos de los intercambiadores de calor, tanto por el lado de los tubos como por el lado de la coraza. En el lado de los tubos observamos una disminución de la temperatura que corresponde con el comportamiento ideal del proceso para ir favoreciendo la producción de NO_2. Se necesita que la temperatura del gas de proceso antes de entrar a la fase de absorción sea de aproximadamente 110 °F para que el agua pueda absorber el NO_2 producido. Por otro lado, en el lado de la coraza se incrementa la temperatura, ya que, es absorbido el calor del gas de proceso y ese calor se aprovecha en una turbina para producir energía. Este calor retirado es aprovechado por los intercambiadores para calentar los gases de cola del mismo proceso. El modelo se valida, realizando un gráfico de dispersión entre los datos calculados mediante los modelos, y los datos reales que arroja la producción en ABOCOL S.A. La figura 19 muestra la relación entre los puntos y la línea de tendencia, comprobando la veracidad del modelo.

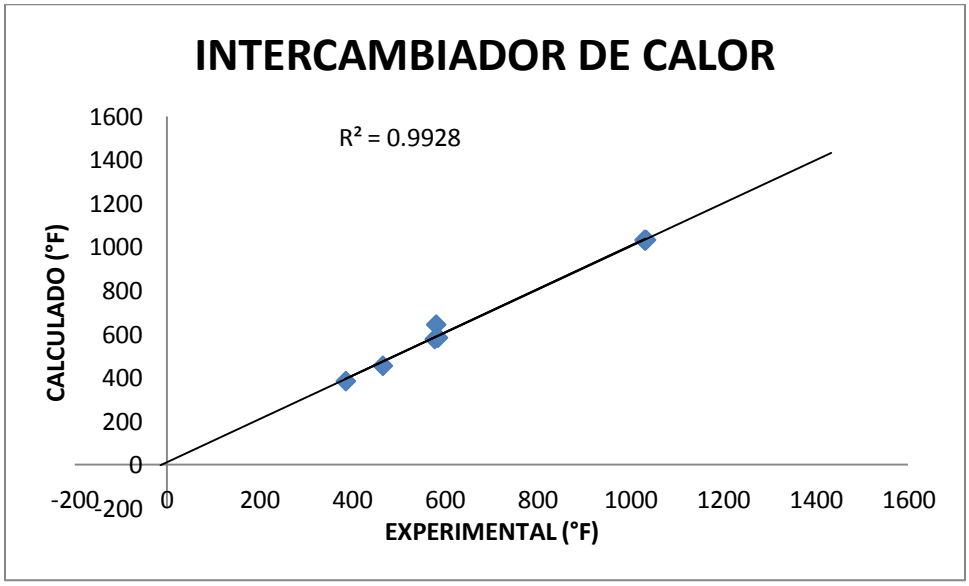


Figura 19. Gráfica de validación para modelo matemático (Intercambiadores de calor)

Para la validación de los modelos, se extrapoló la línea formada por los datos calculados con los reales obtenidos en ABOCOL S.A., además de evaluar dichos datos con el **coeficiente de determinación**, el cual establece una medida del grado de asociación lineal entre la variable respuesta y la variable predictora, concretamente entre la variable respuesta y la recta de regresión estimada, mediante la siguiente ecuación:

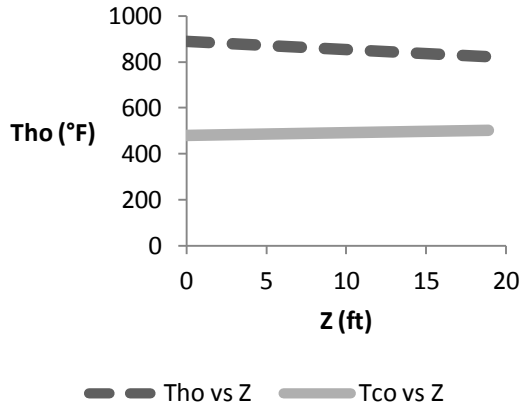
$$\rho^2 = \frac{\sum\left(Y_{estimado} - \overline{Y}\right)^2}{\sum\left(Y - \overline{Y}\right)^2} \tag{51}$$

O bien,

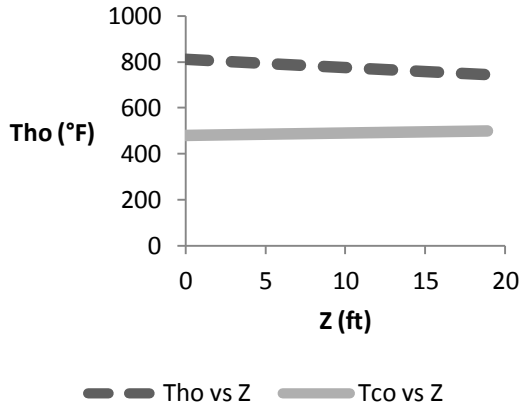
$$\rho = \sqrt{\frac{\sum\left(Y_{estimado} - \overline{Y}\right)^2}{\sum\left(Y - \overline{Y}\right)^2}} \tag{52}$$

Caldera de vapor residual

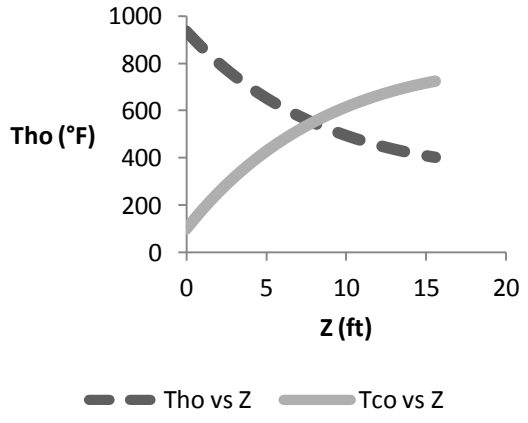
a)



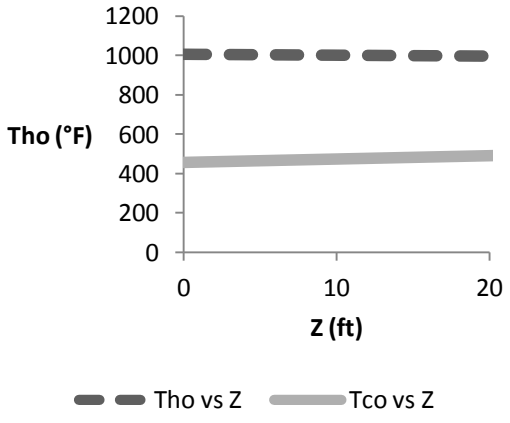
b)



c)



d)



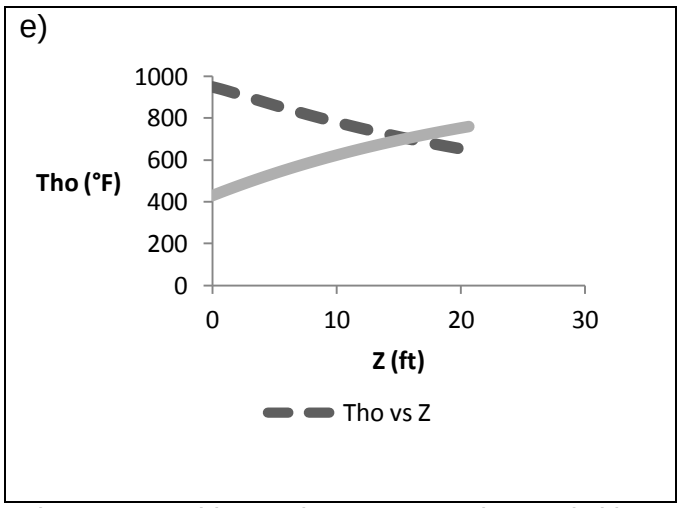


Figura 20. Calderas a) WHB-102A (NAN-1), b) WHB-102B (NAN-1), c) B-801 (NAN-2), d) ME-0163 (NAN-3), e) ME-0152 (NAN-3)

En los resultados se observa el comportamiento de la temperatura del gas de proceso y el agua, en las calderas. La temperatura del gas de proceso tiende a descender, mientras que, el agua que pasa por el lado de la coraza absorbe ese calor para cambiar de fase, todo esto debido a los efectos de transferencia de calor con cambio de fase. El comportamiento entre calderas varía debido a los diferentes flujos volumétricos de gas de proceso que maneja cada caldera. Las calderas de NAN-1 y NAN-3 manejan el mismo flujo de gas de proceso. La diferencia entre estas son las posiciones en que se encuentran las calderas. Mientras que en NAN-1 las calderas están en paralelo, en NAN-3 se encuentran en serie. Los flujos que se manejan en las planta son de 33000 lb/h de agua para cada caldera. Por otra parte, en NAN-2 solo maneja una caldera. El modelo se valida, realizando un gráfico de dispersión entre los datos calculados mediante los modelos, y los datos reales que arroja la producción en ABOCOL S.A. La siguiente figura la relación entre los puntos y la línea de tendencia, comprobando la veracidad del modelo.

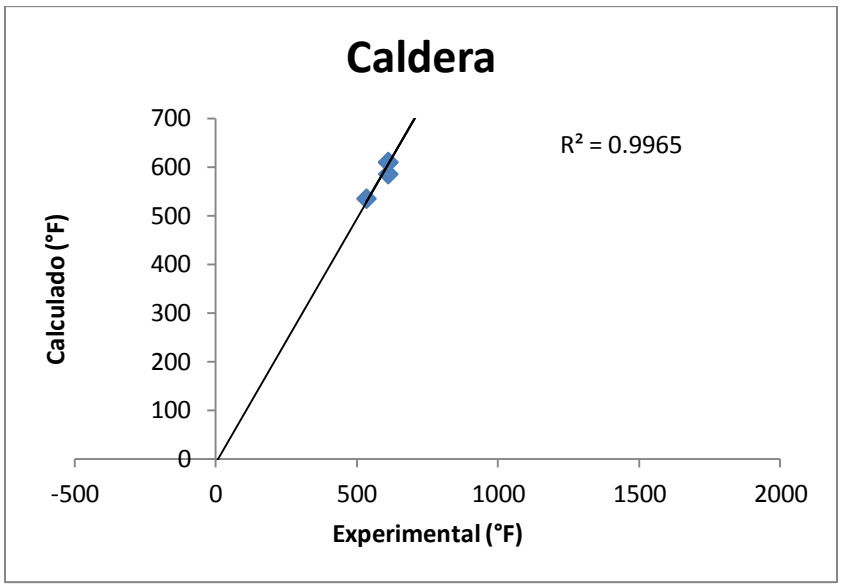


Figura 21. Gráfica de validación para modelo matemático (Calderas de vapor residual)

Enfriador

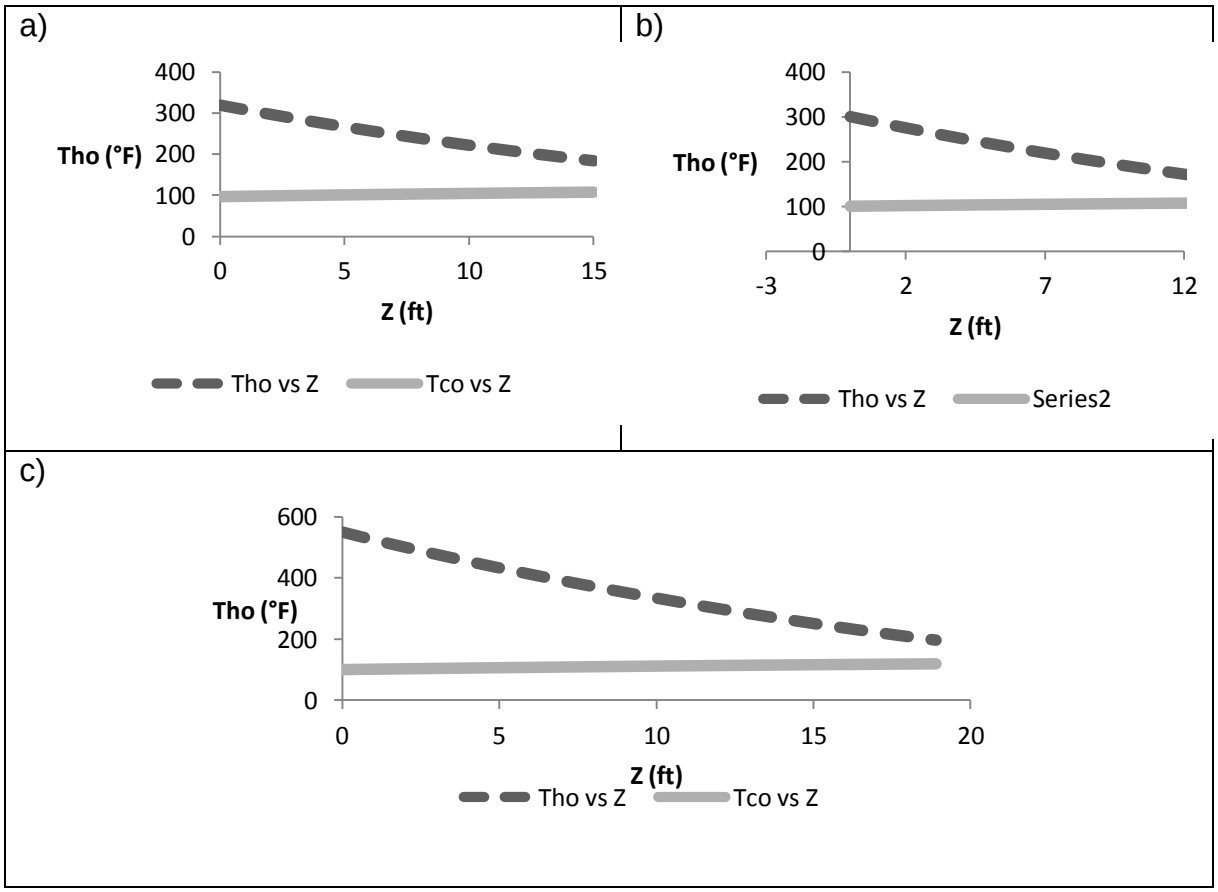


Figura 22. Enfriadores a) E-801, b) NAN-1, c) E-1601

El enfriador funciona como un sistema de disminución de temperatura, donde el gas de proceso va a través de los tubos y el líquido refrigerante, en este caso agua, por la coraza. Tiene el mismo comportamiento del intercambiador de calor, donde aquí la función principal es la reducción de temperatura del gas de proceso. Este equipo es muy importante porque se encuentra justo antes de la etapa de absorción donde la temperatura debe ser la ideal para que se dé el proceso de absorción. Los enfriadores se encargan de bajar la temperatura del gas de proceso, que proviene de otros equipos de transferencia de calor, lo máximo posible (110° F aproximadamente) antes de las torres de absorción. El modelo se valida, realizando un gráfico de dispersión entre los datos calculados mediante los modelos, y los datos reales que arroja la producción en ABOCOL S.A. La siguiente figura la relación entre los puntos y la línea de tendencia, comprobando la veracidad del modelo.

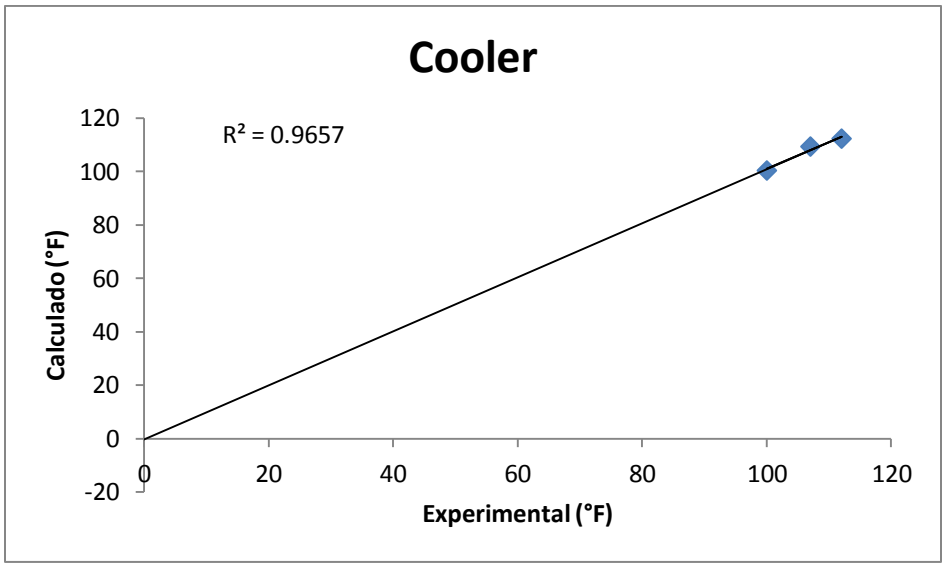


Figura 23. Gráfica de validación para modelo matemático (Enfriador)

Reactor

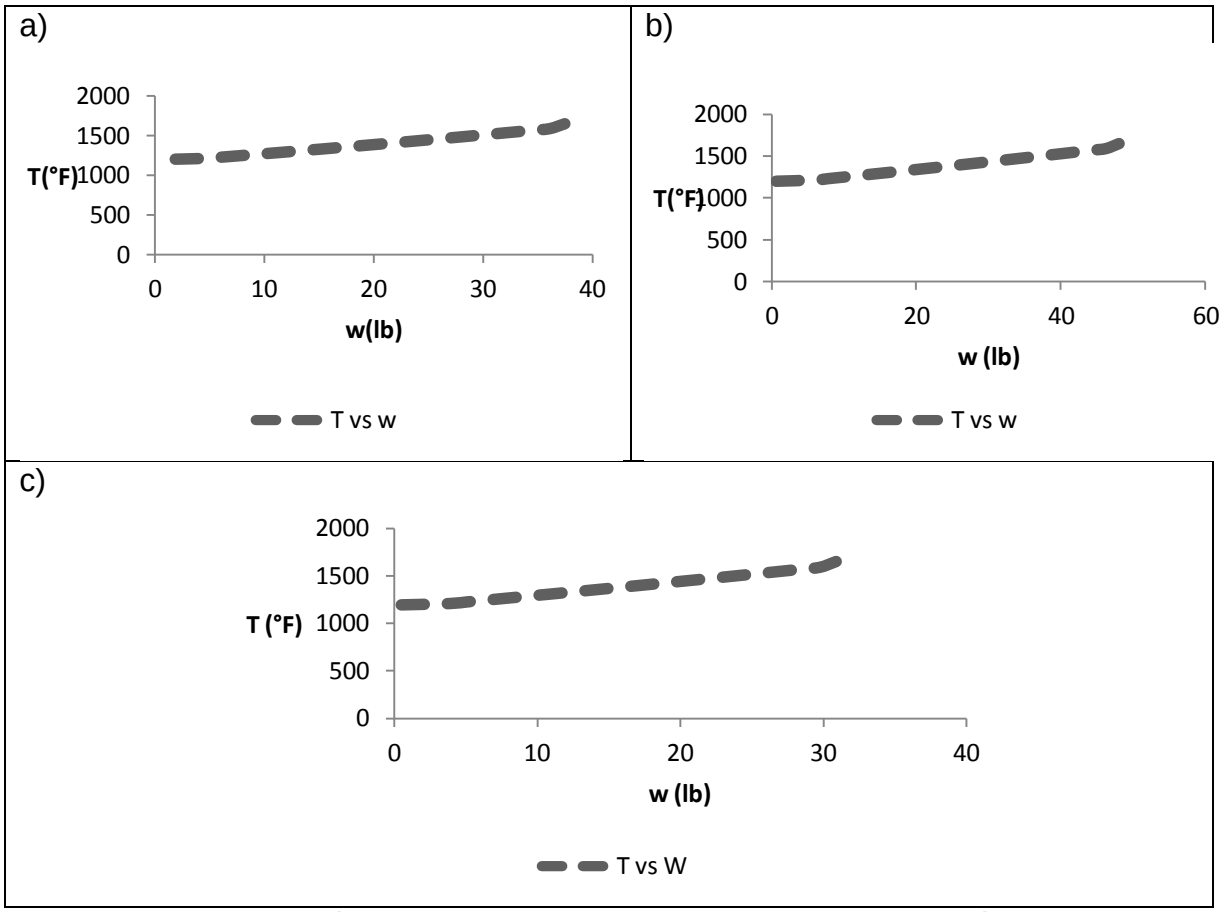


Figura 24. a) Simulación de la Temperatura del reactor (T) en función del peso del catalizador (w) para plantas de producción de acido nítrico: a) NAN1; b) NAN2; c) NAN3

Los resultados muestran un comportamiento similar en los tres reactores, describiendo el cambio de la temperatura del gas de proceso a partir del momento en que este entra en contacto con la matriz de catalizador (gasa), hasta cuando sale del reactor. El modelo propuesto es válido y consistente, ya que al ser la reacción exotérmica, la tendencia de la temperatura es ascender. A medida que avanza el gas de proceso a través de la matriz, la temperatura aumenta, originando la oxidación a NO. La reacción de interés se da a una temperatura de 1700°F, por lo que inicialmente el gas de proceso debe ser llevado a esta condición. Si no se cumplen estas condiciones, y la temperatura en la matriz de catalizador supera los 1787 °F y bajo suministro de oxígeno, se favorece la formación Nitrógeno y mayor cantidad de calor respecto a la formación de NO. Cuando la conversión es incompleta (demasiada velocidad), reaccionan el NO con el NH3 para formar más Nitrógeno molecular y más calor que en la reacción anterior. Luego de que se da la reacción, el gas de proceso pasa por un serpentín,

el cual evita que la temperatura se eleve más de lo necesario, llevándola a 1200 °F aproximadamente. El modelo se valida, realizando un gráfico de dispersión entre los datos calculados mediante los modelos, y los datos reales que arroja la producción en ABOCOL S.A. La siguiente figura la relación entre los puntos y la línea de tendencia, comprobando la veracidad del modelo.

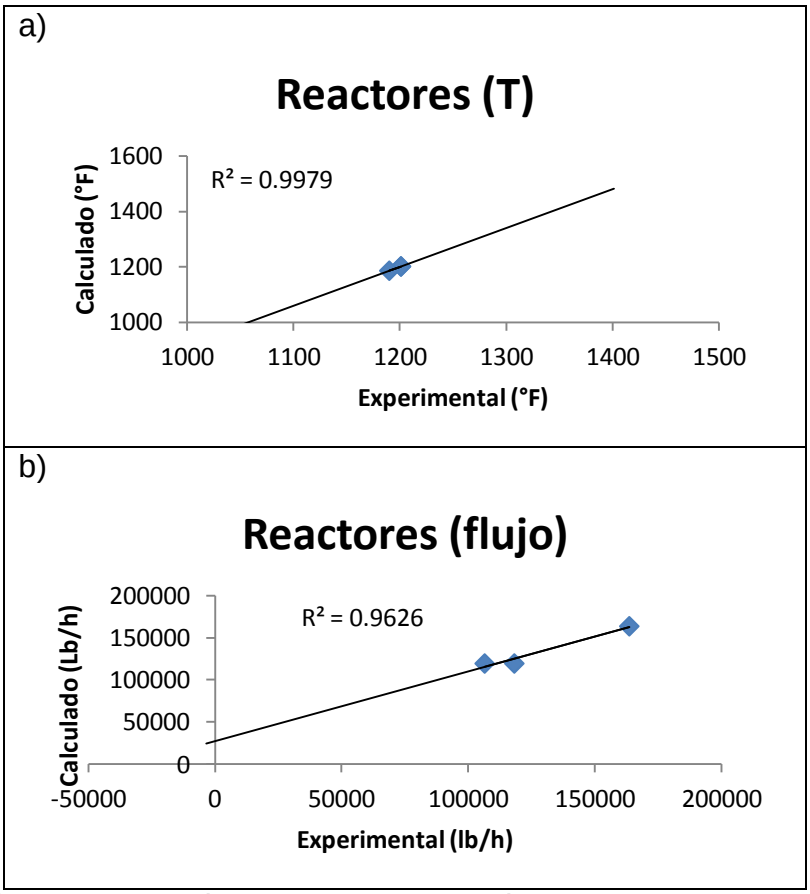


Figura 25. Gráfica de validación para modelo matemático (Reactor) a) Temperatura (°F) b) flujo (lb/h)

Torre de absorción

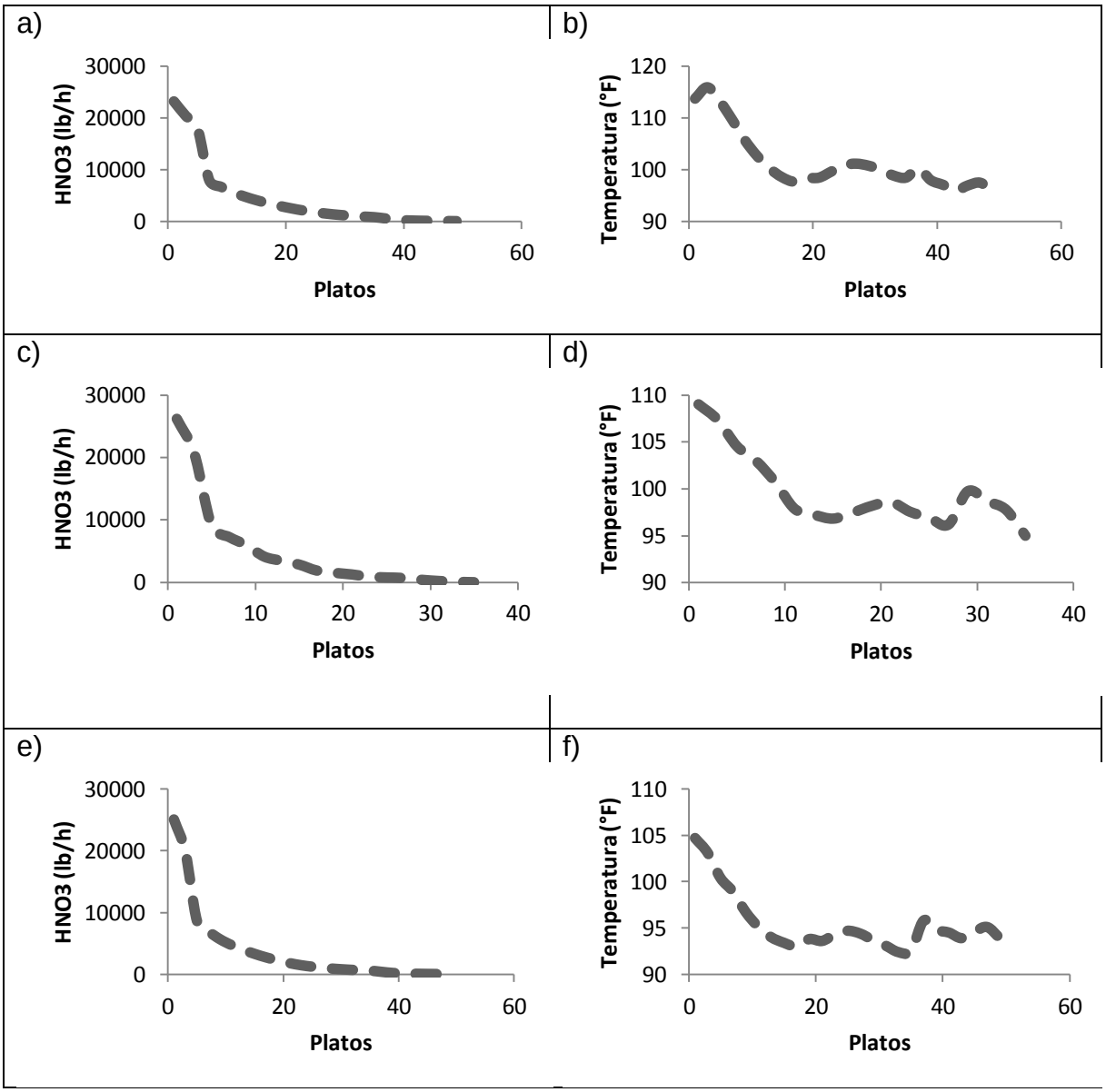


Figura 26. a) HNO_3 producido por plato (NAN-1), b) Temperatura en cada plato (NAN-1), c) HNO_3 producido por plato (NAN-2), d) Temperatura en cada plato (NAN-2), e) HNO_3 producido por plato (NAN-3), f) Temperatura en cada plato (NAN-3)

Se puede observar tanto el comportamiento de la temperatura del ácido a lo largo de cada uno de los platos de la torre, como el ácido nítrico que se ha formado en cada uno de ellos. Los platos son enumerados en orden ascendente, siendo el plato numero uno el condicionado para la salida del acido nítrico formado, es decir, que por el fondo de la torre sale la producción total de ácido nítrico. Las plantas de NAN-1 y NAN-3 presentan dos torres de absorción en serie, una torre de 35 platos

y otra de 14, y para efectos de simulación se pueden acoplar como una sola torre de 49 platos. Como se puede ver en las graficas, en los primeros platos de las torres se muestra una mayor cantidad de acido, porque este a medida que se va formando, va descendiendo por cada plato hasta llegar al primero. Por otra parte, en el primer plato se nota mayor temperatura porque se forma una mayor cantidad de acido mediante una reacción que es exotérmica y además, se tiene en cuenta que en la parte inferior de la torre, entran los gases de proceso a una temperatura más elevada. El sistema de refrigeración de cada plato es necesario, ya que, la absorción se favorece a temperaturas bajas y como la reacción es exotérmica la temperatura aumenta. Para una mejor representación gráfica, se tuvo en cuenta los datos que mostraron un cambio significativo en temperatura y producción de acido nítrico. Los valores de temperatura en cada plato, obedecen al diseño de la torre ya que la entrada de los gases se encuentra en la parte inferior de la torre, precisamente debajo del primer plato. El modelo se valida, realizando un gráfico de dispersión entre los datos calculados mediante los modelos, y los datos reales que arroja la producción en ABOCOL S.A. La figura 27 muestra la relación entre los puntos y la línea de tendencia, comprobando la veracidad del modelo.

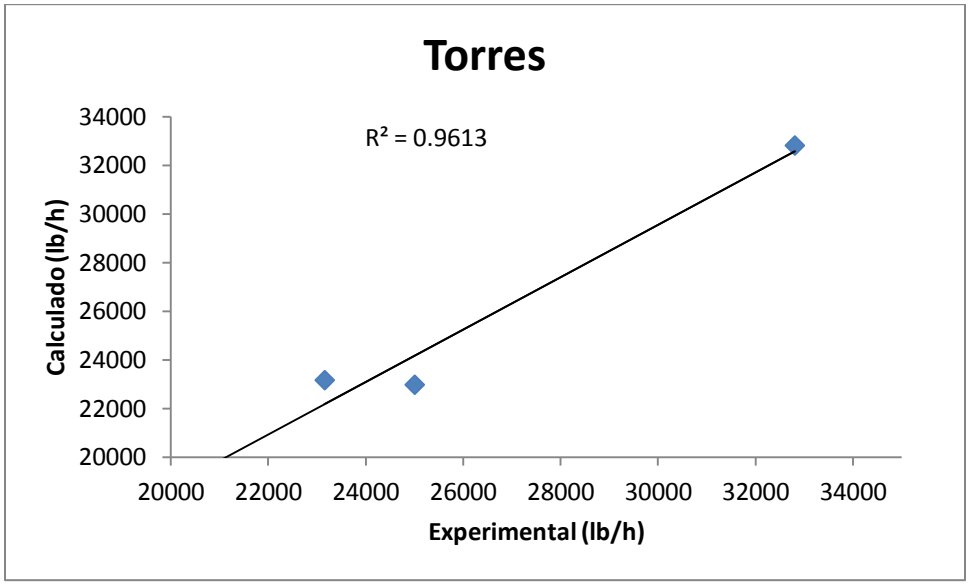


Figura 27. Gráfica de validación para modelo matemático (Torres de absorción)

En el Anexo F se presenta el manual del usuario del "Software HNO3.UdC-*A* Simulator V1.0

Compresor – Turbina

Al ser planteado, el modelo matemático, como una ecuación lineal, no es necesario observar el comportamiento a través del compresor y la turbina, ya que este es un dato específico de generación de la energía necesaria para producir la presión que debe llevar el gas de proceso para su recorrido por todo el proceso de producción. Los datos de entrada son los flujos de gases de cola que generan el movimiento de las hélices de la turbina, la presión de entrada y salida, que muestran la proporción de la caída de presión, el radio de la turbina y el ángulo de cabeceo de turbinas.

La gráfica de validación para compresores y turbinas está representada en una sola figura, debido a que la energía que se genera en la turbina, es la consume el compresor. El modelo se valida, realizando un gráfico de dispersión entre los datos calculados mediante el modelo, y los datos reales que arroja la producción en ABOCOL S.A. La siguiente figura muestra la relación entre los puntos y la línea de tendencia, comprobando la veracidad del modelo.

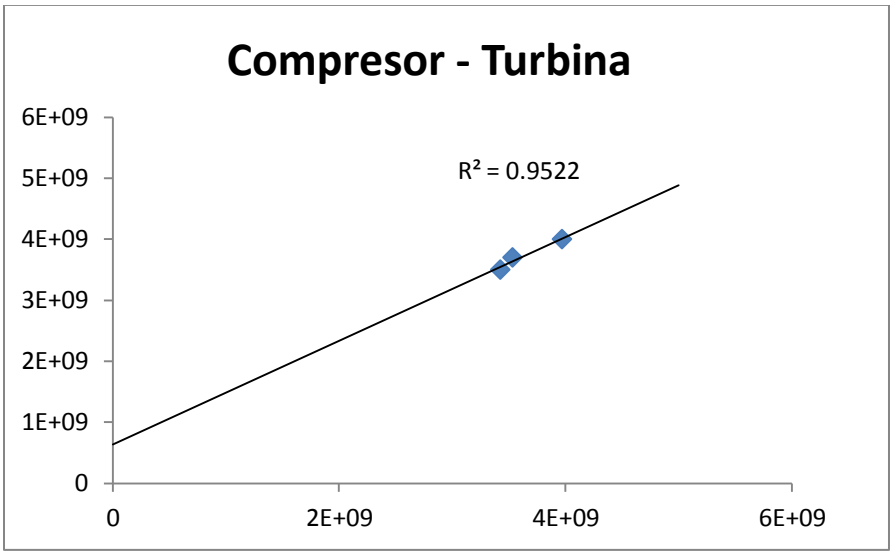


Figura 28. Gráfica de validación para modelo matemático de compresor y turbina.

El dato de R^2 (coeficiente de determinación) arroja un dato que representa un 95.22% de acercamiento con los datos reales, validando el modelo.

Filtros

Al ser el modelo matemático planteado en una ecuación lineal, no es necesario observar el comportamiento a través del filtro, ya que la concentración de impurezas, o material indeseado, cambia exactamente en el punto donde se encuentra el material filtrante, por lo tanto estos puntos pueden ser comparados en una tabla, presentada a continuación, donde se presentan los flujos de entrada y salida a los distintos filtros, además del filtrado remanente (material particulado) en las distintas plantas:

Tabla 29. Datos del balance de materia de los filtros en las plantas de producción de ácido nítrico de ABOCOL S.A.

Flujos entrada (lb/h)	Flujos salida (lb/h)	Flujo filtrado (lb/h)
6739	6708.977755	30.022245
9768	9724.48356	43.51644
7556	7522.33802	33.66198
101388	100830.5891	557.4109464
155242	154388.5105	853.4894676
113458	112834.2306	623.7693924
95250	94661.9265	588.0735
165630	164607.4004	1022.59962
122450	121693.9937	756.0063

Se puede observar, comparando con los datos reales de planta, que la aproximación entre los flujos de salida hacia de los distintos filtros, y los hallados con las ecuaciones, son bastante aproximados, arrojando errores aproximadamente del 1%. La caída de presión en los filtros es despreciable (1 psig) ya que se manejan presiones de aproximadamente 109 psig en los filtros de platino, por lo tanto es un porcentaje menor al 1%. El modelo se valida, realizando un gráfico de dispersión entre los datos calculados mediante el modelo, y los datos reales que arroja la producción en ABOCOL S.A. La siguiente figura muestra la relación entre los puntos y la línea de tendencia, comprobando la veracidad del modelo.

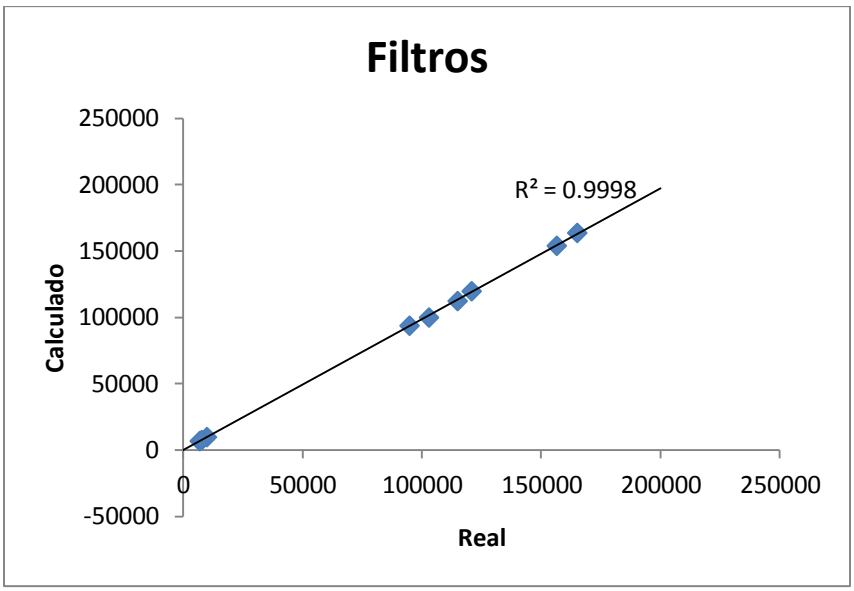


Figura 29. Gráfica de validación para modelo matemático (Filtros)

7. CONCLUSIONES

Se obtuvo un software para la evaluación de las plantas de ácido nítrico de ABOCOL S.A., el cual permitió evaluar y simular las condiciones de operación de estas, realizando conclusiones respecto a las condiciones de entrada que alimentan al simulador.

Se definieron las variables más relevantes para el desarrollo de los modelos de los equipos, entre las cuales se encuentran la presión, la temperatura, la longitud de los equipos, flujos, eficiencia del reactor, concentraciones, entre otras, las cuales permitieron delimitar las aproximaciones matemáticas y los alcances de la simulación.

El desarrollo de los modelos matemáticos de los equipos permitió representar el proceso de producción de ácido nítrico de manera bastante aproximada. El desarrollo y modelamiento de los equipos se realizó en estado estable, debido a que los objetivos propuestos para la tesis fueron estructurados de acuerdo a los requerimientos planteados por la empresa ABOCOL S.A.

La implementación de este software permitirá a los operadores e ingenieros tomar decisiones respecto al comportamiento de la planta en el momento de la evaluación, sin necesidad de recurrir a herramientas computacionales muy complejas, o que halla la necesidad de pagar por la obtención de estas.

El principal método numérico usado para la solución de las ecuaciones diferenciales que simulan el comportamiento de los equipos fue el Runge-Kutta, que al tener ecuaciones con suficientes variables, arroja datos efectivos, con mínimos errores. Además de la solución de los modelos, la validación se apoyó en gráficas que comparan los datos obtenidos con los reales facilitados por la empresa, además de obtener el coeficiente de determinación, R^2, que asocia linealmente la variable respuesta y la recta de regresión estimada. Los valores del R^2 oscilaron entre 0.94 y 0.99, concluyendo que dichos modelos representan de manera muy aproximada el comportamiento real de la planta.

El uso del software permite establece relacionar diferentes áreas del conocimiento, especialmente en ingeniería química, de tal manera que el usuario se forme en competencias básicas de procesos, modelamiento y simulación. Además, otros simuladores comerciales no representan de buena manera la absorción reactiva que se da para la formación de Ácido Nítrico.

8. RECOMENDACIONES

Se recomienda obtener más datos específicos de los equipos, especialmente del reactor, tales como perfiles de concentración, orden de las reacciones deseadas, velocidad de reacción, entre otras, con el fin de que si se pretende realizar una segunda versión del software, este se encuentre mucho más cercano a la realidad.

Se recomienda realizar el modelamiento matemático de las torres de absorción utilizando otros métodos, tales como el método de ecuaciones MESH (el método de la suma de flujos (SR) desarrollado por Burnigham y Otto), para comparar con el realizado en esta tesis de grado y observar las ventajas y desventajas de ambos métodos, permitiendo concluir cual sería más aproximado.

Se recomienda, en un futuro, simular el arranque de la planta, que es una operación muy importante en planta. Para esto deberían considerarse en los modelos, el control automático pertinente para llegar al estado estable deseado.

Se recomienda a futuro, que para ajustes del software, se considere a futuro la modelación y simulación del reactor, teniendo en cuenta las tres reacciones posibles de oxidación de Amoníaco.

Teniendo en cuenta el modelo matemático planteado para los filtros, se recomienda plantear un modelo alterno que tenga en cuenta un cambio diferencial en la concentración del material particulado (filtrado remanente), teniendo en cuenta que los modelos para filtros son semiempíricos y requieren de datos experimentales para poder realizar el modelo.

En general, se recomienda para toda la simulación, plantear modelos que incluyan control automático de todos los equipos, con el fin de simular de manera dinámica el proceso, y compararlo con el planteado en este proyecto para tener mayores aproximaciones.

9. REFERENCIAS

[1] Ministerio de ambiente, vivienda y desarrollo territorial, republica de Colombia. Guía para manejo de sustancias seguro y gestión ambiental de 25 sustancias químicas- ácido nítrico.

[2] Muñoz R. y Bertomeu J.R. (2003). La historia de la ciencia en los libros de texto: La(s) hipótesis de Avogadro. UAB published articles.

[3] Mittasch A. (1953). Saltpetersaure aus Ammoniak, Verlag Chemie. Weinheim.

[4] Fairlie A. M.(1919). The manufacture of Nitric Acid. New York,Reinhold publiching Co., Inc.

[5] Hunt L.B. y Master Sc. PhD. (1958). The ammonia oxidation process for nitric acid manufacture. Revista Platinum metals review

[6] Roj E. y Wilk M. (2002). Simulation of the sieves plate absorption column for nitric acid oxide absorption using neural networks. Instytut Nawosow Sztucznych, Pulawy, Poland.

[7] Chatterjee I.B. y Joshi J.B. (2008). Modeling, simulation and optimization: Mono pressure nitric acid process. Revista Chemical engineering journal.

[8] ABOCOL S.A. Manual de operaciones de planta de ácido nítrico.

[9] R.B. Bird, W. E. Stewart, E. N. Lightfood.fenómenos de transporte. (1992). Ed. Reverté, España, 1993.

[10] Smith, Van Ness & Abott. Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química, Quinta edición. Editorial Prentice Hall; 1997; página 137-138.

[10]Departamento de Investigación (2005).Instituto Tecnológico Superior de Champotón.

[11] Grupo de investigación en control industrial. Facultad de Ingeniería. Universidad del Valle. Modelamiento Matemático de Procesos industriales (2000).

[12] George Stephanopoulus. Chemical Process Control an Introduction to Theory and Practice. 3ª edicion. Editorial Prentice Hall; 1984; 48-51.

[14] John Metcalfe Coulson, J.F. Richardson, Fidel Mato Vázquez. Ingeniería química. Flujo de fluidos, transmisión de calor y transferencia.

[15] Mills, A.F. Transferencia de Calor. Tema: Ebullición Irwin, 1995.

[16] Van Wylen. Termodinámica. 2da edición. 2002. Tablas de vapor saturado.

[17] Koshkin, Shirkévich. Manual de física elemental. Editorial MIR. Tablas de propiedades de algunas sustancias (1975).

[18] Chatterjee I.B. y Joshi J.B. (2008). Modeling, simulation and optimization: Mno pressure nitric acid process. Revista Chemical engineering journal.

[19] Yunus Cengel. Transferencia de Calor. 2nd Edicion. McGraw Hill p.p 489-493

[20] H. Scott Fogler. Elementos de ingeniería de las reacciones químicas. 4ª edición. Editorial Prentice Hall; 2008.p.p. 477.

[21] V.A. Sadykov ,L.A. Isupova , I.A. Zolotarskii , L.N. Bobrova , A.S. Noskov , V.N. Parmon , E.A. Brushtein ,T.V. Telyatnikova , V.I. Chernyshev , V.V. Lunin (2000). Oxide catalysts for ammonia oxidation in nitric acid production: properties and perspectives. Elsevier, applied catalysis.

[22] V.I. Glushchenko and E.D. Kirichuk. Mathematical model of Absorption Columns for the production of Nitric Acid. International Chemical Engineering. 22(1), pp. 181-I 86 (1982)

[23] Martyn S. Ray and David W. Johnston. Chemical Engineering Design Proyect. Volume 6. Gordon and Breach Science Publishers. Chapter 9, Appendix G.

[24] P. Buthod and all. Process component design, capítulo 7 “pumps and compressors”. Universidad de Tulsa, Oklahoma.

[25] Siegfried Heier, "Grid Integration of Wind Energy Conversion Systems," John Wiley & Sons Ltd, 1998, ISBN 0-471-97143-X

[26] Diseño de equipos e instalaciones. Bombas y compresores. Tema 5: Ecuaciones para el diseño de compresores, página 5.22 y 5.23

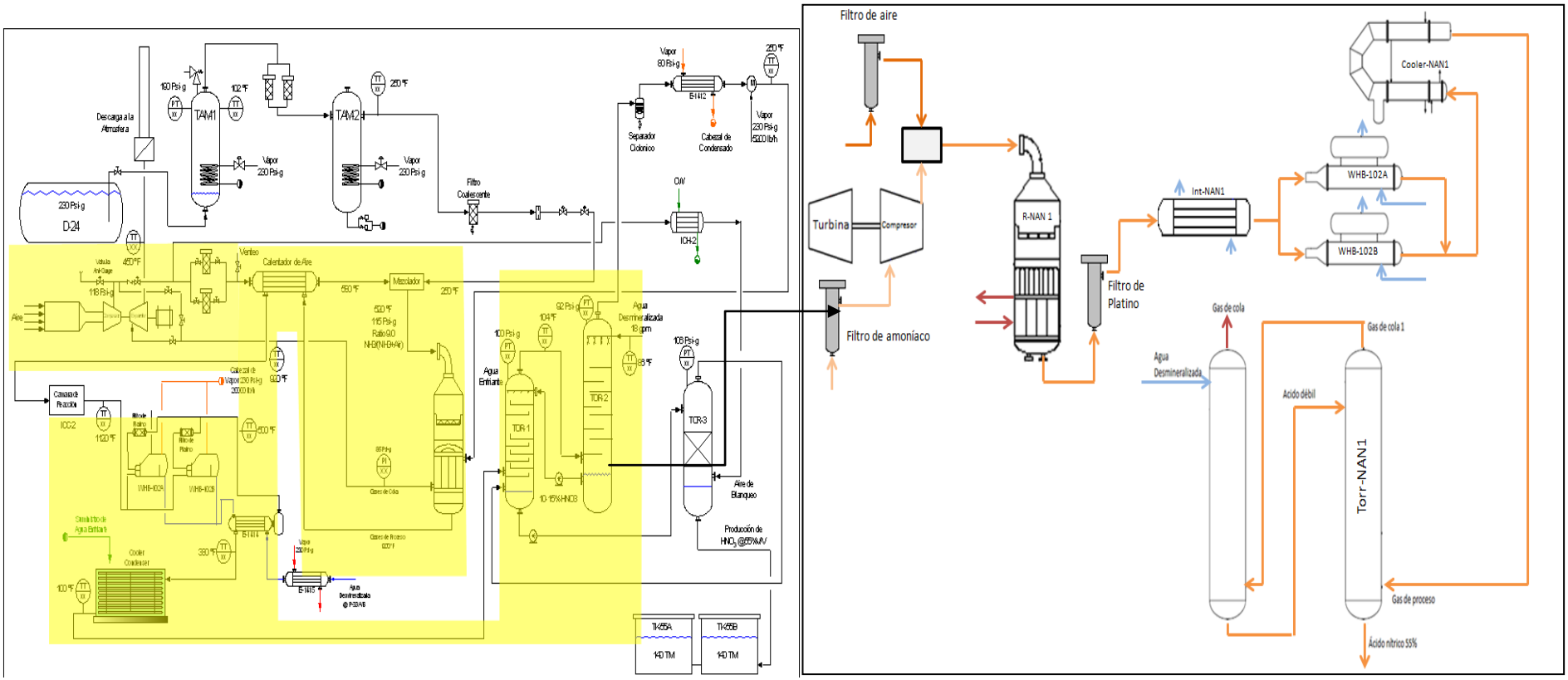
[27] Ives, K. J.Capture mechanisms in filtration. “The Scientific Basis of Filtration”. Noordhoff-Leiden, 1975.

[28] Denis Zill. Ecuaciones Diferenciales. 4ª edición. International Thomson. p.p 424-428.

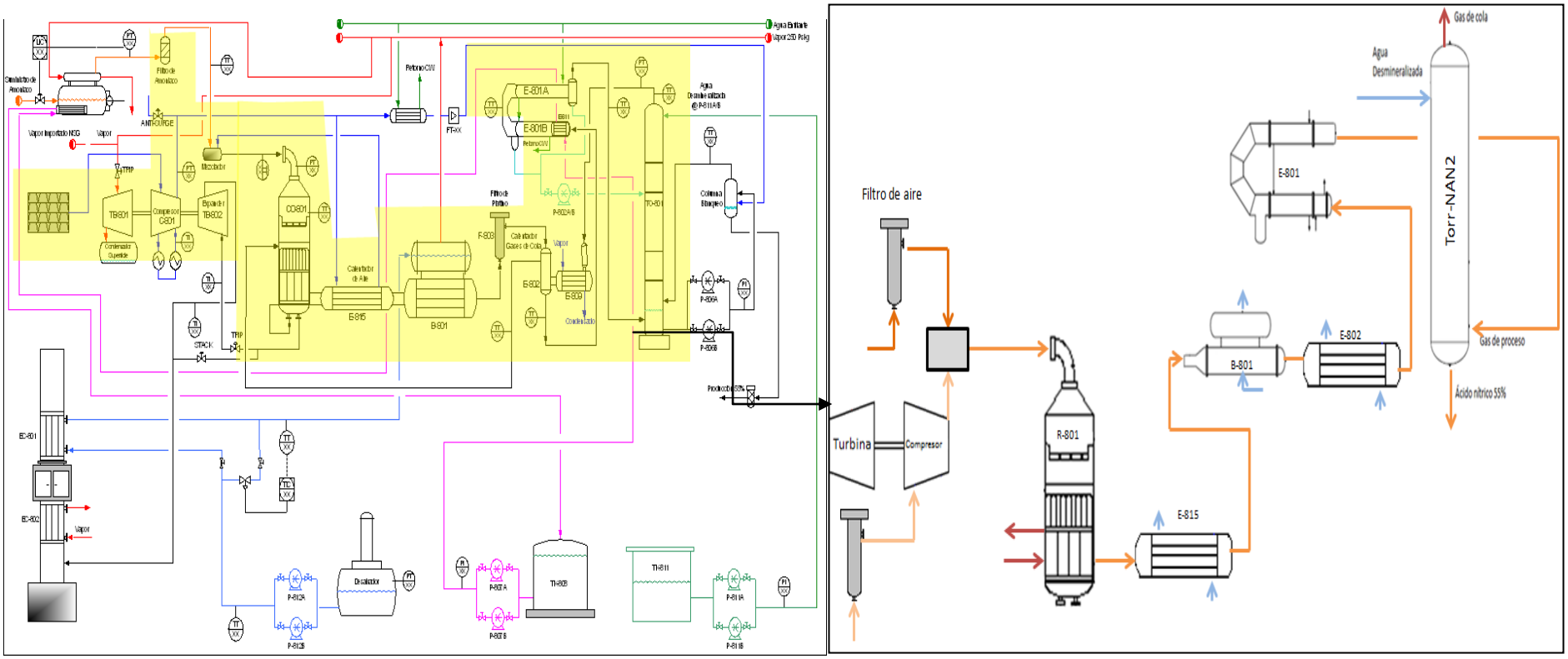
ANEXOS

A. DIAGRAMA DE FLUJO DE PROCESO DE NAN1, NAN2, NAN3

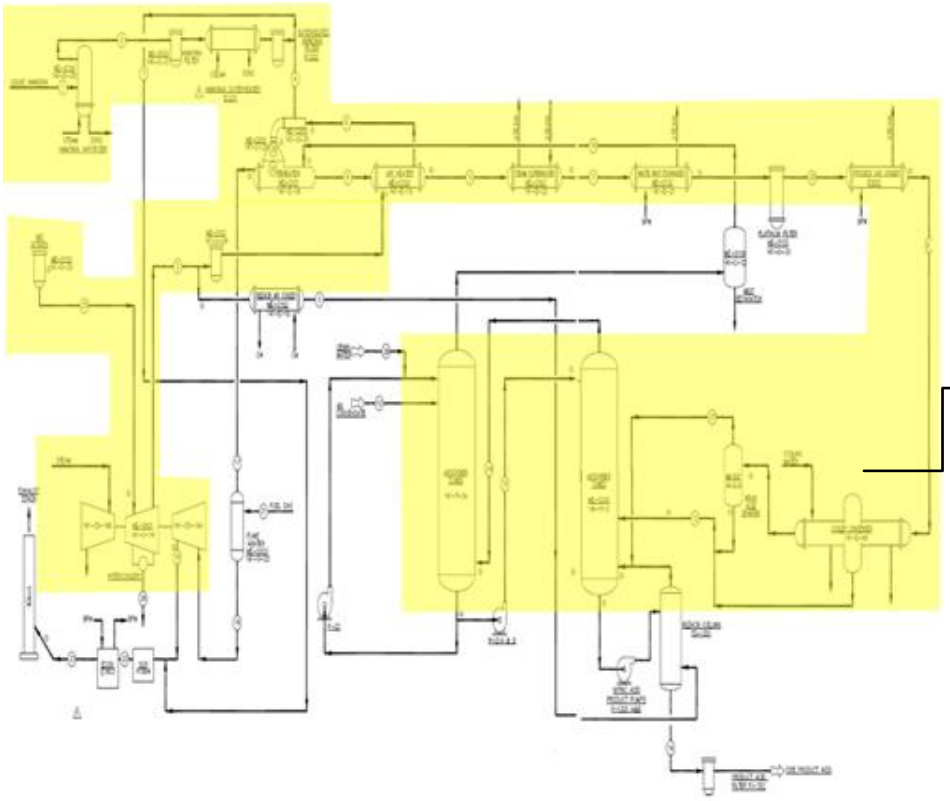
NAN 1

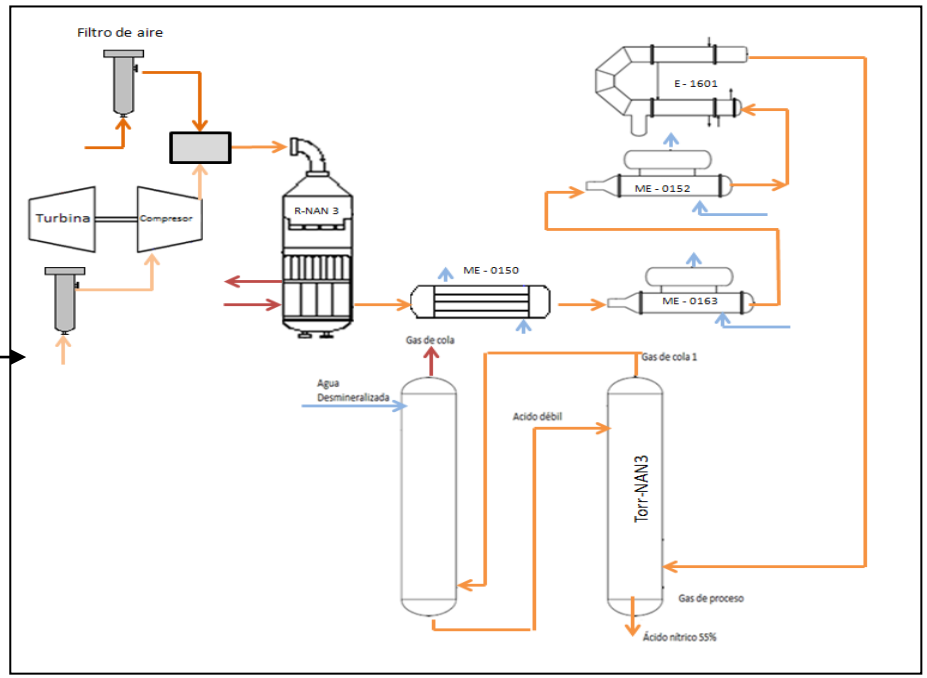


NAN 2


Filtro de aire
Turbina
Compresor
R-801
E-815
E-801
B-801
E-802
Torr-NAN2
Agua Desmineralizada
Gas de cola
Gas de proceso
Ácido nítrico 55%

NAN 3




Filtro de aire
Turbina
Compresor
R-NAN 3
E - 1601
ME - 0152
ME - 0150
ME - 0163
Gas de cola
Gas de cola 1
Agua
Desmineralizada
Acido débil
Torr-NAN3
Gas de proceso
Ácido nitrico 55%

B.PROCEDIMIENTO MODELAMIENTO MATEMATICO

- EQUIPOS DE TRANSFERENCIA DE CALOR
- Nomenclatura:

  $\dot{m}$: Flujo másico (lb/h)

  $\widehat{H}$: Entalpia (BTU/lb)

  Fh: Fluido caliente

  Fc: Fluido frio

  z: Longitud (ft)

  U_T: Coeficiente global de transferencia de calor (BTU/h ft^2 °F)

  T_{hi}: Temperatura de entrada fluido caliente (°F)

  T_{ho}: Temperatura de salida fluido caliente (°F)

  T_{ci}: Temperatura de entrada fluido frio (°F)

  T_{co}: Temperatura de salida fluido frio (°F)

- Modelo

Balance en tubos

$$\widehat{H}_{Fh}|_z - \widehat{H}_{Fh}|_{z+\Delta z} - QA\Delta z = 0$$

Donde $H = \dot{m}CpT$

Reemplazando:

$$\dot{m}_{Fh}Cp_{Fh}T\big|_z - \dot{m}_{Fh}Cp_{Fh}T\big|_{z+\Delta z} - QA\Delta Z = 0$$

Teniendo en cuenta que: $\frac{dF}{dx} = \frac{F(x+h)-F(x)}{h}$

Dividiendo por ΔZ

$$-\dot{m}_{Fh}Cp_{Fh}\frac{\left[T\big|_{z+\Delta z} - T\big|_z\right]}{\Delta Z} - QA = 0$$

$$-\dot{m}_{Fh}Cp_{Fh}\frac{dT_{ho}}{dz} - QA = 0$$

Teniendo en cuenta que: $Q = U_T LMDT$

$$LMDT = \frac{(T_{hi} - T_{co}) - (T_{ho} - T_{ci})}{\ln\left(\frac{T_{hi} - T_{co}}{T_{ho} - T_{ci}}\right)}$$

Sustituyendo tenemos:

$$\frac{dT_{ho}}{dz} = -\frac{U_T A \dfrac{(T_{hi} - T_{co}) - (T_{ho} - T_{ci})}{\ln\left(\frac{T_{hi} - T_{co}}{T_{ho} - T_{ci}}\right)}}{\dot{m}_{Fh} Cp_{Fh}}$$

Balance en coraza:

$$\widehat{H}_{Fc}|_{z+\Delta z} - \widehat{H}_{Fc}|_z + QA\Delta z = 0$$

Donde $H = \dot{m}CpT$

Reemplazando:

$$\dot{m}_{Fc} Cp_{Fc} T\big|_{z+\Delta z} - \dot{m}_{Fh} Cp_{Fh} T\big|_z + QA\Delta Z = 0$$

Teniendo en cuenta que: $\frac{dF}{dx} = \frac{F(x+h) - F(x)}{h}$

Dividiendo por ΔZ

$$\dot{m}_{Fc} Cp_{Fc} \frac{\left[T\big|_{z+\Delta z} - T\big|_z\right]}{\Delta Z} + QA = 0$$

$$\dot{m}_{Fc} Cp_{Fc} \frac{dT_{co}}{dz} + QA = 0$$

Teniendo en cuenta que: $Q = U_T LMDT$

$$LMDT = \frac{(T_{hi} - T_{co}) - (T_{ho} - T_{ci})}{\ln\left(\frac{T_{hi} - T_{co}}{T_{ho} - T_{ci}}\right)}$$

$$\frac{dT_{co}}{dz} = \frac{U_T A \dfrac{(T_{hi} - T_{co}) - (T_{ho} - T_{ci})}{\ln\left(\frac{T_{hi} - T_{co}}{T_{ho} - T_{ci}}\right)}}{\dot{m}_{Fc} Cp_{Fc}}$$

- ECUACIONES

El coeficiente de transferencia de calor global, esta dado por:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

Donde $h_f = \frac{Nu\ k}{L}$, dx_i = espesor de *i*, *k* = conductividad térmica de *i*, *i*, representa el material del equipo.

$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$; para flujo turbulento (correlación de Dittus y Boelter)

$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^{0.4} \left(\frac{\mu}{\mu_o}\right)^{0.14}$; Correlación de Sieder y Tate

$Nu = \frac{\left(\frac{f}{2}\right) Re_D Pr}{1.07 + \frac{900}{Re_D} - \frac{0.63}{1+10\mathrm{Pr}} + 12.7\left(\frac{f}{2}\right)^{\frac{1}{2}} (Pr^{\frac{2}{3}} - 1)}$; Correlación de Pethukov & Kirilov

- Re= numero de Reynolds; $Re = \frac{G_T D}{\mu}$
- Velocidad másica lb/h ft^2; $G_T = \frac{\dot{m}}{a_T}$
- Área de transferencia de los tubos ft^2 ; a_T
- Viscosidad lb/ft h ; $\mu = \mu_{mezcla = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i \mu_i}{\sum_{i=1}^{n} x_j \varphi_{ij}}}$; Ecuación de Wilke

  $x_{i,j}$= fracción molar de i y j
  $\mu_{i,j}$= Viscosidades de i y j a la presión y temperatura del sistema
  $M_{i,j}$= peso molecular de i y j

  $\varphi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j}\right)^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{1/2} \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{1/2}\right]^2$
- Pr= Numero de Prandtl ; $Pr = \frac{C_p \mu}{k}$
- *f* =coeficiente de fricción, se obtiene del diagrama de moody.

- Reactor
- Nomenclatura

  $r´a$: Velocidad de reacción (lbmol/h lbcat)
  T: Temperatura del gas de proceso (°F)
  Ta: Temperatura del refrigerante (°F)
  ρ_b: Densidad de bulto (masa de solido/volumen)

U_a: Coeficiente global de transferencia de calor (BTU/h ft^2 °F)
ΔH_{Rx}: Calor de reacción (J/lbmol)
Fao: Flujo molar inicial de amoniaco (lb mol/h)
θ_i: Moles i/moles a
Cp: Capacidad calorífica (J/lb mol K)
X: Conversión

Balance en el reactor:

$$\frac{dF}{dW} = -r'_a$$

$$C_A = \frac{r'_A.W}{V} + C_{Ao}$$

$$F_a = -r_a W - F_{ao}$$

Donde:

Fa: Flujo de salida del reactor
Fao: Flujo de entrada al reactor
W: Peso del catalizador.
$-r_a$: Velocidad de reacción.

$$\frac{dT}{dW} = \frac{\frac{Ua}{\rho_b}(T_a - T) + r'_a \Delta H_{Rx}(T)}{F_{ao}\left(\sum \theta_i c_p + \Delta C_p X\right)}$$

Donde queda : $T = -\left[\left[F_{ao}(\Sigma\theta_i C_p + \Delta C_p X) - r'_a \Delta H_{Rx}(T)\right]\frac{\rho_b}{U_a} - T_a\right]$

- La densidad del bulto $\rho_b = \frac{-r_a}{-r'_a}$
- Calor de reacción $\Delta H_{Rx} = \left(\frac{d}{a}H_D + \frac{c}{a}H_C - \frac{d}{a}H_D - H_A\right)$
- Capacidad calorífica $\Delta C_p = \left(\frac{d}{a}Cp_D + \frac{c}{a}Cp_C - \frac{d}{a}Cp_D - Cp_A\right)$

El coeficiente de transferencia de calor global, esta dado por:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

Donde $h_f = \frac{Nu\,k}{L}$, dx_i = espesor de *i*, *k* = conductividad térmica de *i*, *i*, representa el material del equipo.

$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$; para flujo turbulento (correlación de Dittus y Boelter)

$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^{0.4} \left(\frac{\mu}{\mu_o}\right)^{0.14}$; Correlación de Sieder y Tate

$Nu = \frac{\left(\frac{f}{2}\right) Re_D Pr}{1.07 + \frac{900}{Re_D} - \frac{0.63}{1+10\mathrm{Pr}} + 12.7\left(\frac{f}{2}\right)^{\frac{1}{2}}\left(Pr^{\frac{2}{3}} - 1\right)}$; Correlación de Pethukov & Kirilov

- Re= numero de Reynolds; $Re = \frac{G_T D}{\mu}$
- Velocidad másica lb/h ft^2; $G_T = \frac{\dot{m}}{a_T}$
- Área de transferencia de los tubos ft^2 ; a_T
- Viscosidad lb/ft h ; $\mu = \mu_{mezcla = \sum_{i=1}^{n} \frac{x_i \mu_i}{\sum_{i=1}^{n} x_j \varphi_{ij}}}$; Ecuación de Wilke

  $x_{i,j}$= fracción molar de i y j

  $\mu_{i,j}$= Viscosidades de i y j a la presión y temperatura del sistema

  $M_{i,j}$= peso molecular de i y j

  $\varphi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}}\left(1 + \frac{M_i}{M_j}\right)^{-1/2}\left[1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_j}\right)^{1/2}\left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{1/2}\right]^2$
- Pr= Numero de Prandtl ; $Pr = \frac{C_p \mu}{k}$
- f =coeficiente de fricción, se obtiene del diagrama de moody.

✓ Torre de absorción

El algoritmo utilizado para desarrollar el modelo matemático para una torre de absorción se describe a continuación:

Etapa 1: El gas de proceso de composición conocida entra a la torre a una temperatura (°F) y presión (psig) dada.

Etapa 2: Un poco de oxidación del NO se da en un espacio vacío antes del primer plato. El grado de oxidación es determinado usando la ecuación de Bodenstein.

$$k_1 t P^2 = (b-a)^{-2}\left\{[X(b-a)/(1-X)b] - Ln\left[(1-X)/(1-\left(\frac{aX}{k1}\right))\right]\right\}$$

Donde:

- k_1= Constante de velocidad, obtenida de: $\log k_1 = \left[\left(\frac{635}{T}\right) - 1.0261\right]$;
- t = tiempo de residencia en el espacio de oxidación (segundos)
- P= presión de operación (bar)
- b = fracción molar inicial de O2 en el gas;
- 2a = fracción molar inicial de NO en el gas;
- X = fracción de NO oxidado adicionalmente
- T = temperatura del gas (K)

Etapa 3: La composición del gas de proceso es recalculada basada en la oxidación de NO a NO_2

Etapa 4: Se calcula la constante de equilibrio de la reacción:

$$NO_2 \underset{\longleftarrow}{\xrightarrow{k_2}} N_2O_4$$

$$k_2 = \frac{p^2{}_{NO2}}{p_{N2O4}} = 10^{(8.756-\frac{2838}{T})}\left[1 - \left[(T/210.3) + \left(\frac{790}{T}\right) - (3.8794)\right]p_{NOX}\right]$$
$$= A[1 - Bp_{NOX}]$$

Donde: A,B = Constantes de reacción reportadas por Bodenstein, para el equilibrio entre NO_2 y N_2O_4, dado por la ecuación.

Etapa 5: La composición del gas es revisada de nuevo. El incremento en la temperatura es calculado de acuerdo con el cambio en la relación NO_2/N_2O_4 y de acuerdo con la oxidación de NO. Ambas reacciones son exotérmicas.

El incremento en la temperatura del gas esta dado por:

$$\Delta T = [(6.2x10^3\ X\ G_{NO}) + 2.845x10^4(G'_{N2O4} - G_{N2O4}]/G_{gas}C_{gas}$$

Donde

- ΔT = incremento de la temperatura en el gas (K)
- G_{NO} = Flujo molar de NO en gas de alimentación (kmol/s)
- $G´_{N2O4}$= flujo molar de N_2O_4 después de la oxidación (kmol/s)
- G_{N2O4}= flujo molar de N_2O_4 antes de la oxidación (kmol/s)
- G_{gas} = Caudal molar de la mezcla total del gas (kmol/s)
- C_{gas}= promedio de C_p de la mezcla de gases (J/kmol K)

Ahora la temperatura y composición de entrada al primer plato son conocidas.

Etapa 6: El numero de moles de HNO_3 formados cuando el gas pasa a través de la mezcla liquida en el plato, es calculado. Este cálculo incluye un término que describe efectivamente la eficiencia del plato. Las moles de acido formado están dado por:

$$F_a = \left[p_{NO} + p_{NOX} - \frac{k3E^3 + 2E^2}{k2 + E}\right](G_{NO} + \ G_{NOX})\ C(p_{NO} + p_{NOX})^{-1}$$

Donde:

- F_a= moles de acido formado
- p_{NO} = presión parcial de NO
- p_{NOX} = presión parcial de NO_2 + N_2O_4
- k_2 = Constante de equilibrio NO_2/N_2O_4 (Bodenstein)
- $k_3 = k_4/k_2$
- k_4 = constante de equilibrio NO/N_2O_4, hallada por:

$$\log k4 = 7.412 - 20.28921W + 32.47322W^2 - \ 30.87W^3$$

- W= concentración de acido presente en el plato;
- E= Presión parcial de equilibrio de NO_2, determinada por:

$$3k_3E^3 + \left(\frac{2E^2}{k_2}\right) + E = 3p_{NO} + p_{NOX}$$

Etapa 7: El balance molar por componentes es recalculado de acuerdo con las moles de acido nítrico formado. La técnica de evaluación (etapa 3) para el balance de equilibrio de NO_2 y el N_2O_4, es usada de nuevo. Las concentraciones de los gases calculadas después de la formación de HNO_3 son también usadas como los valores de composición de entrada al siguiente plato.

Etapa 8: conociendo el numero de moles de acido formado por reacción química/absorción, las moles de acido y agua requerida por el siguiente plato pueden ser calculados y por tanto la concentración es determinada.

Etapa 9: Un balance de energía plato por plato también es posible. Los factores considerados son el calor de reacción de la oxidación de NO, el calor de reacción por cualquier cambio en el equilibrio NO_2/N_2O_4, el calor del flujo de la solución de acido débil del plato anterior al siguiente y el calor sensible para enfriar los dos, la reacción de gases y la solución de acido pasando a través de cada plato. Este balance de calor nos da la refrigeración requerida en cada plato. Se usa una simple derivación de la ecuación.

Etapa 10: Los cálculos siguen hasta completar el numero de platos, lo que conlleva a regresar a la etapa 2 mediante la cual la fracción de NO oxidada en el espacio vacío por encima del plato es recalculada. Los pasos siguen de la etapa 2 a la 10.[23]

- ✓ Turbinas

La siguiente ecuación representa el modelo en régimen estacionario de la potencia generada por la turbina.

$$P_T = cp(\lambda, \beta)\frac{\rho \pi R^2}{2} v^3$$

Siendo P_T potencia mecánica de salida de la turbina (W); cp: coeficiente de potencia de la turbina; ρ densidad del aire (kg/m^3); R^2 radio de la turbina que multiplicado por pi forma el área de barrido (m^2) es decir área que abarcan las palas del rotor; v velocidad del viento (m/s); β ángulo de cabeceo, ángulo de giro de las palas; λ velocidad especifica.

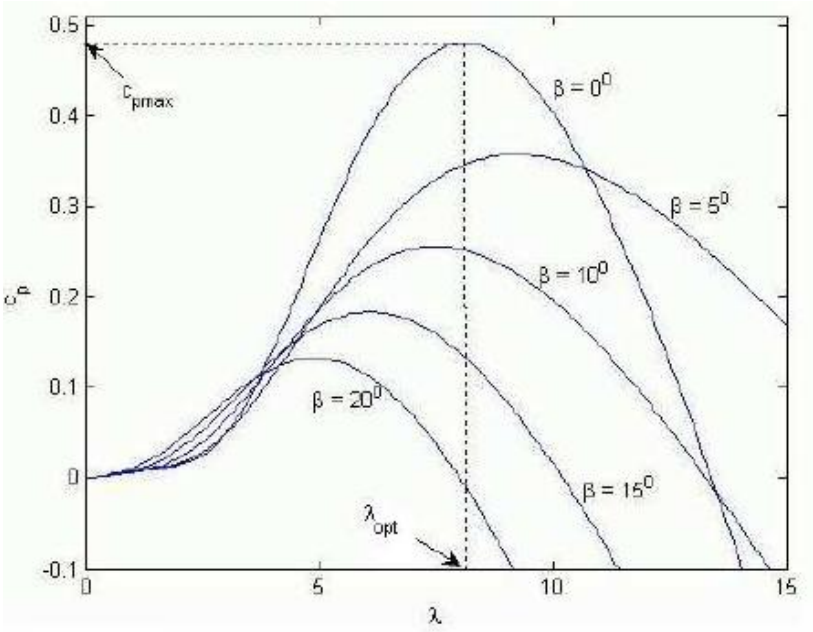
Coeficiente de potencia se obtiene en función de la velocidad específica y el ángulo de cabeceo. Se modela como[25]:

$$cp(\lambda, \beta) = c_1\left(\frac{c_2}{\lambda_i} - c_3\beta - c_4\right)e^{-c_6}\lambda_i + c_6\lambda$$

Siendo la velocidad especifica la relación de proporción entre la velocidad de la turbina w_T y la velocidad del viento v.

$$\lambda = \frac{w_t R}{v}$$

La expresión del coeficiente de potencia está basada en la distribución de weibull, que es una distribución de probabilidad, el cálculo se hace mediante la siguiente grafica:



- ✓ Compresores

Para el modelado del compresor, se tiene en cuenta que trabaja en estado estable. La potencia del compresor es dependiente de la potencia generada por una turbina. El compresor centrífugo consiste en un rotor que gira dentro de una carcasa provista de aberturas para la entrada y salida del aire. El rotor convierte la energía mecánica del eje en cantidad de movimiento y por tanto energía cinética del aire, lo que aumenta la presión del mismo. La presión alcanzada por el aire en el compresor es suficiente para el gas a lo largo del resto del proceso.

El trabajo producido por el compresor esta dado por la ecuación:

$$-Ws = Z\frac{RkT_1}{M(k-1)}\left[\left(\frac{P_2}{P_1}\right)^{\frac{k-1}{k}} - 1\right]$$

Donde Z es el factor de compresión del gas; R es el radio del compresor; k es el coeficiente isentropico; M es el flujo másico; P_2 es la presión de salida; P_1 es la presión de entrada. El coeficiente isentrópico, k, está definido por la siguiente ecuación:

$$k = \frac{C_p}{C_v}$$

Donde C_p y C_v son las capacidades caloríficas a presión y volumen constante, respectivamente. Para hallar el trabajo real del compresor, tenemos la ecuación (45), donde η_s es la eficiencia del compresor:

$$-Wa = Ws / \eta s$$

- ✓ Filtros

El flujo de gas entra por el fondo de este, saliendo el gas filtrado por la parte superior, disminuyendo la concentración de los sólidos inertes (impurezas o platino, dependiendo del filtro). La concentración de inertes varía en el punto exacto donde se encuentra el material filtrante. [27]

Siguiendo el algoritmo planteado para el modelado de filtro, se necesita el balance de materia para la caracterización de la recuperación del residuo.

Por lo tanto:

$$F_{in} - F_{out} - F_{filtrado} = 0$$

Donde F_{in} es el flujo másico de entrada del gas con las partículas a filtrar; F_{out} es la másico de salida de gas con una cantidad de mínima de filtrado (tendiente a cero); y $F_{filtrado}$ es el flujo másico que sale de residuo filtrado. El término $F_{filtrado}$ puede ser hallado mediante la siguiente ecuación:

$$\mathrm{F}_{\mathrm{filtrado}} = X.(F_{in})$$

Los flujos F_{in} y X (fracción másica de inerte) son datos suministrado por ABOCOL S.A., que permiten hallar $F_{filtrado}$ y F_{out} mediante las ecuaciones anteriormente descritas (46 y 47), asumiendo que la remoción de los filtros es total, por lo tanto, para hallar la remoción real, se debe multiplicar el $F_{filtrado}$ por un valor X_{rr} denominado fracción real de remoción, dato que oscila entre 0.97 y 0.99 (Dato suministrado por ABOCOL S.A.), por lo tanto las ecuaciones para $F_{filtrado}$ y F_{out} quedarían:

$$\mathrm{F}_{\mathrm{filtrado.real}}. = F_{filtrado}(X_{rr}) = X(F_{in})(X_{rr})$$

$$F_{out.real} = F_{out} + (F_{filtrado} - F_{filtradoreal})$$

C. TABLAS PARA CÁLCULOS

C.1) Coeficiente Csf

Combinación líquido-superficie	C_{sf}
Agua – cobre	0,0130
Agua – cobre rayado	0,0068
Agua – cobre esmerilado y pulido	0,0128
Agua – cobre esmerilado y pulido, tratado con parafina	0,0147
Agua – acero inoxidable	0,0133
Agua – acero inoxidable pulido mecánicamente	0,0132
Agua – acero inoxidable esmerilado y pulido	0,0080
Agua – acero inoxidable picado, relleno con teflón	0,0058
Agua – platino	0,0130
Agua – latón	0,0060
Benceno – cromo	0,0100
Alcohol etílico – cromo	0,0027
Tetracloruro de carbono – cobre	0,0130
Tetracloruro de carbono – cobre esmerilado y pulido	0,0070
n-Pentano – cobre esmerilado y pulido	0,0154
n-Pentano – níquel esmerilado y pulido	0,0127
n-Pentano – cobre esmerilado y pulido	0,0074
n-Pentano – cobre laminado	0,0049

C.2) Agua saturada. Tabla de presiones

TABLA A-5

Agua saturada. Tabla de presiones

		Volumen específico, m³/kg		Energía interna, kJ/kg			Entalpía, kJ/kg			Entropía, kJ/kg · K		
Pres., P kPa	Temp. sat., T_{sat} °C	Líq. sat., v_f	Vapor sat., v_g	Líq. sat., u_f	Evap., u_{fg}	Vapor sat., u_g	Líq. sat, h_f	Evap., h_{fg}	Vapor sat., h_g	Líq. sat., s_f	Evap., s_{fg}	Vapor sat., s_g
1.0	6.97	0.001000	129.19	29.302	2355.2	2384.5	29.303	2484.4	2513.7	0.1059	8.8690	8.9749
1.5	13.02	0.001001	87.964	54.686	2338.1	2392.8	54.688	2470.1	2524.7	0.1956	8.6314	8.8270
2.0	17.50	0.001001	66.990	73.431	2325.5	2398.9	73.433	2459.5	2532.9	0.2606	8.4621	8.7227
2.5	21.08	0.001002	54.242	88.422	2315.4	2403.8	88.424	2451.0	2539.4	0.3118	8.3302	8.6421
3.0	24.08	0.001003	45.654	100.98	2306.9	2407.9	100.98	2443.9	2544.8	0.3543	8.2222	8.5765
4.0	28.96	0.001004	34.791	121.39	2293.1	2414.5	121.39	2432.3	2553.7	0.4224	8.0510	8.4734
5.0	32.87	0.001005	28.185	137.75	2282.1	2419.8	137.75	2423.0	2560.7	0.4762	7.9176	8.3938
7.5	40.29	0.001008	19.233	168.74	2261.1	2429.8	168.75	2405.3	2574.0	0.5763	7.6738	8.2501
10	45.81	0.001010	14.670	191.79	2245.4	2437.2	191.81	2392.1	2583.9	0.6492	7.4996	8.1488
15	53.97	0.001014	10.020	225.93	2222.1	2448.0	225.94	2372.3	2598.3	0.7549	7.2522	8.0071
20	60.06	0.001017	7.6481	251.40	2204.6	2456.0	251.42	2357.5	2608.9	0.8320	7.0752	7.9073
25	64.96	0.001020	6.2034	271.93	2190.4	2462.4	271.96	2345.5	2617.5	0.8932	6.9370	7.8302
30	69.09	0.001022	5.2287	289.24	2178.5	2467.7	289.27	2335.3	2624.6	0.9441	6.8234	7.7675
40	75.86	0.001026	3.9933	317.58	2158.8	2476.3	317.62	2318.4	2636.1	1.0261	6.6430	7.6691
50	81.32	0.001030	3.2403	340.49	2142.7	2483.2	340.54	2304.7	2645.2	1.0912	6.5019	7.5931
75	91.76	0.001037	2.2172	384.36	2111.8	2496.1	384.44	2278.0	2662.4	1.2132	6.2426	7.4558
100	99.61	0.001043	1.6941	417.40	2088.2	2505.6	417.51	2257.5	2675.0	1.3028	6.0562	7.3589
101.325	99.97	0.001043	1.6734	418.95	2087.0	2506.0	419.06	2256.5	2675.6	1.3069	6.0476	7.3545
125	105.97	0.001048	1.3750	444.23	2068.8	2513.0	444.36	2240.6	2684.9	1.3741	5.9100	7.2841
150	111.35	0.001053	1.1594	466.97	2052.3	2519.2	467.13	2226.0	2693.1	1.4337	5.7894	7.2231
175	116.04	0.001057	1.0037	486.82	2037.7	2524.5	487.01	2213.1	2700.2	1.4850	5.6865	7.1716
200	120.21	0.001061	0.88578	504.50	2024.6	2529.1	504.71	2201.6	2706.3	1.5302	5.5968	7.1270
225	123.97	0.001064	0.79329	520.47	2012.7	2533.2	520.71	2191.0	2711.7	1.5706	5.5171	7.0877
250	127.41	0.001067	0.71873	535.08	2001.8	2536.8	535.35	2181.2	2716.5	1.6072	5.4453	7.0525
275	130.58	0.001070	0.65732	548.57	1991.6	2540.1	548.86	2172.0	2720.9	1.6408	5.3800	7.0207
300	133.52	0.001073	0.60582	561.11	1982.1	2543.2	561.43	2163.5	2724.9	1.6717	5.3200	6.9917
325	136.27	0.001076	0.56199	572.84	1973.1	2545.9	573.19	2155.4	2728.6	1.7005	5.2645	6.9650
350	138.86	0.001079	0.52422	583.89	1964.6	2548.5	584.26	2147.7	2732.0	1.7274	5.2128	6.9402
375	141.30	0.001081	0.49133	594.32	1956.6	2550.9	594.73	2140.4	2735.1	1.7526	5.1645	6.9171
400	143.61	0.001084	0.46242	604.22	1948.9	2553.1	604.66	2133.4	2738.1	1.7765	5.1191	6.8955
450	147.90	0.001088	0.41392	622.65	1934.5	2557.1	623.14	2120.3	2743.4	1.8205	5.0356	6.8561
500	151.83	0.001093	0.37483	639.54	1921.2	2560.7	640.09	2108.0	2748.1	1.8604	4.9603	6.8207
550	155.46	0.001097	0.34261	655.16	1908.8	2563.9	655.77	2096.6	2752.4	1.8970	4.8916	6.7886
600	158.83	0.001101	0.31560	669.72	1897.1	2566.8	670.38	2085.8	2756.2	1.9308	4.8285	6.7593
650	161.98	0.001104	0.29260	683.37	1886.1	2569.4	684.08	2075.5	2759.6	1.9623	4.7699	6.7322
700	164.95	0.001108	0.27278	696.23	1875.6	2571.8	697.00	2065.8	2762.8	1.9918	4.7153	6.7071
750	167.75	0.001111	0.25552	708.40	1865.6	2574.0	709.24	2056.4	2765.7	2.0195	4.6642	6.6837

C.3) Temperaturas de fusión y ebullición, calores específicos de algunas sustancias

Sustancia	T fusión °C	$L_f \cdot 10^3$ (J/kg)	T ebullición °C	$L_v \cdot 10^3$ (J/kg)
Hielo (agua)	0	334	100	2260
Alcohol etílico	-114	105	78.3	846
Acetona	-94.3	96	56.2	524
Benceno	5.5	127	80.2	396
Aluminio	658.7	322-394	2300	9220
Estaño	231.9	59	2270	3020
Hierro	1530	293	3050	6300
Cobre	1083	214	2360	5410
Mercurio	-38.9	11.73	356.7	285
Plomo	327.3	22.5	1750	880
Potasio	64	60.8	760	2080
Sodio	98	113	883	4220

D. HERRAMIENTAS MATEMATICAS UTILIZADAS

La solución numérica de un sistema de orden superior, de la forma

$$\frac{dx_1}{dt} = f_1(t, x_1, x_2, ..., x_n)$$
$$\frac{dx_2}{dt} = f_2(t, x_1, x_2, ..., x_n)$$

$$\frac{dx_n}{dt} = f_n(t, x_1, x_2, ..., x_n)$$

Se puede aproximar con una versión adoptada del método de Runge-Kutta de cuarto orden, para un sistema:

$$x' = f(t, x, y)$$
$$y' = g(t, x, y)$$
$$x(t_0) = x_0 \ , \ y(t_0) = y_0$$

Se obtiene:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{6}(m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4)$$
$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

En donde:

$$m_1 = hf(t_n, x_n, y_n) \qquad k_1 = hg(t_n, x_n, y_n)$$
$$m_2 = hf(t_n + \frac{1}{2}h, x_n + \frac{1}{2}m_1, y_n + \frac{1}{2}k_1) \qquad k_2 = hg(t_n + \frac{1}{2}h, x_n + \frac{1}{2}m_1, y_n + \frac{1}{2}k_1)$$
$$m_3 = hf(t_n + \frac{1}{2}h, x_n + \frac{1}{2}m_2, y_n + \frac{1}{2}k_2) \qquad k_3 = hg(t_n + \frac{1}{2}h, x_n + \frac{1}{2}m_2, y_n + \frac{1}{2}k_2)$$
$$m_4 = hf(t_n + h, x_n + m_3, y_n + k_3) \qquad \mathrm{k}_4 = hg(t_n + h, x_n + m_3, y_n + k_3)$$

Este método multipasos permite resolver ecuaciones diferencia donde intervienen muchos aspectos, la gran ventaja de este método es su exactitud y facilidad de programación, la primera característica se debe a que la ecuación diferencial debe evaluarse muchas veces en cada etapa, y así se genera precisión.[28]

E. MEMORIA DE CÁLCULO PARA LOS EQUIPOS DE NAN1, NAN2 Y NAN3

NAN-1

Orden de los equipos de la planta:

- Filtro de aire
- Filtro de amoníaco
- Reactor
- Filtro de platino
- Intercambiador de calor
- Caldera de vapor residual
- Caldera de vapor residual
- Cooler Condenser (enfriador)
- Torre de Absorción

Filtro de aire NAN-1

i. Tipo de filtro : De aire
ii. Material Reactor y material filtrante: Acero carbón y lana de vidrio.
iii. Dimensiones: 13.12 ft altura y 4.725 ft diámetro.
iv. Cálculos:

Con los datos de entrada de flujo de entrada (F_{in}), la concentración (X), y la fracción de remoción (Xrr), se obtienen los flujos de salida y filtrado, reales, mediante las ecuaciones planteadas en los modelos, presentadas a continuación:

$$F_{filtrado} = X.(F_{in})$$

$$F_{filtrado.real} = F_{filtrado}(X_{rr}) = X(F_{in})(X_{rr})$$

$$F_{out.real} = F_{out} + (F_{filtrado} - F_{filtradoreal})$$

F-in	103388
X	0.00561
F-out (calculado)	102807.993
F-filtrado (calculado)	580.00668
fracción removida (Xrr)	0.98
F-out real	102819.593
F-filtrado real	568.406546

Filtro de amoníaco NAN-1

i. Tipo de filtro : De amoníaco
ii. Material Reactor y material filtrante: Acero carbón e inoxidable 304 y lana de vidrio.
iii. Dimensiones: 13.12 ft altura y 4.725 ft diámetro.
iv. Cálculos:

Partiendo de los datos de entrada de flujo de entrada (F_{in}), la concentración (X), y la fracción de remoción (Xrr), se obtienen los flujos de salida y filtrado, reales, mediante las ecuaciones planteadas en los modelos:

F-in	6739
X	0.0045
fracción removida (Xrr)	0.99
F-out (100%)	6708.6745
F-filtrado (100%)	30.3255
F-out real	6708.97776
F-filtrado real	30.022245

Reactor

i. Tipo de Reactor : PBR
ii. Material Reactor y Gasa: Acero inoxidable 321 y Platino rodio (90:10)
iii. Dimensiones: 15 ft altura y 5.25 ft Diámetro

	Propiedades	Agua	NH3	O2	N2
Entrada	Flujo másico (lb/hr)	1051.2	6687.8	22908.8	75857.6
	Temperatura (°F)	550	550	550	550
	Presión (PSIG)	120	175	120	120

	Propiedades	Agua	NO +NO2	O2	N2
Salida	Flujo másico (lb/hr)	12852.18	10879.2	7330.56	75409.6
	Temperatura (°F)	1201	1201	1201	1201
	Presión (Psig)	113	113	113	113

iv. Cálculos

Partiendo de la reacción de interés que ocurre a las condiciones dadas y del balance de moles para un reactor PBR tenemos:

$$4NH_3 + 5O_2 \rightarrow 4NO + 6H_2O$$

$$F_{A0}\frac{dX}{dW} = -r'_A$$

Para la velocidad de reacción tenemos:

$$r'_A = K[NH_3]^{0.36}[O_2]^{0.14}$$

Donde K es la constante de velocidad, dada por la ecuación de Arrhenius:

$$K = A \cdot e^{\frac{-Ea}{RT}}$$

Donde A es el denominado factor preexponencial y E es la energía de activación de la reacción, R es la constante de los gases y "T" es la temperatura en grados K.

Parámetros:

$$A = 3.5x10^{20}$$

$$E_a = 523754\ \text{J/mol}$$

$$R = 8.3143\ \text{J/K} \cdot \text{mol}$$

$$T = 1199.83K$$

Con estos valores calculamos la constante de velocidad K para luego obtener el valor de la velocidad reacción.

$$K = 5.52608\text{x}10^{-3}$$

Con este valor de K y las concentraciones de NH_3 y O_2 calculamos la velocidad de reacción:

$$r'_A = 1.9134\text{x}10^{-3}$$

Balance de energía:

El balance de energía, en el reactor esta dado por el balance de energía para un reactor no isotérmico empacado (PBR) en estado estacionario con cambiador de calor. El flujo de calor $\Delta\dot{Q}$, se da en términos del coeficiente total de transferencia de calor U; el área de intercambio de calor a y la diferencia entre la temperatura del refrigerante T_a y la temperatura del reactor, T.

Está dado por la siguiente expresión:

$$\frac{dT}{dW} = \frac{\frac{U_a}{\rho_a}(T_a - T) + r'_A \Delta H_{RX}(T)}{F_{ao}(\sum \Theta_i C_p + \Delta C_p X)} \quad (29)$$

Donde U_a es el coeficiente global de calor, ρ_b es la densidad de bulto ΔH_{RX} es el calor de reacción, F_{ao} es el flujo molar inicial de amoniaco, θ_i es moles i/moles a, C_P es la capacidad calorífica y X es la conversión del reactor.

Donde el calor de reacción a la temperatura T, ΔHrx(T) se halla mediante la siguiente ecuación:

$$\Delta H_{Rx}(T) = \frac{d}{a}H_D(T) + \frac{c}{a}H_C(T) - \frac{b}{a}H_B(T) - H_A(T)$$

Para este caso los H y Cp para cada compuesto serían:

	Entalpía H (KJ/Kmol)	*Calor específico Cp (KJ/(lb.°f))*	$\Theta_{\theta i}$
NH_3	-798.1	0.896961	1
O_2	3.03×10^4	0.279997	1.25
NO	1.20×10^5	0.294767	1
H_2O	-2.068×10^5	0.6105285	1.25

Los demás términos constantes se hallan con las siguientes ecuaciones:

$\Delta Cp = \frac{d}{a}Cp_D + \frac{c}{a}Cp_C - \frac{b}{a}Cp_B - Cp_A$; $\Delta Cp = -0.029118\ KJ/lb\ °f$

$X = Conversion = 93.5\%$

$\rho_b = \frac{r_a}{r'_a}$; $\rho_b = 0.47836\ lb/ft^3$

$r_a = Vel.de\ reaccion\ en\ funcion\ del\ volumen\ del\ reactor$

$r'_a = Vel.\,de\ reaccion\ en\ funcion\ de\ la\ masa\ del\ catalizador$

$\sum \theta_i c_p = 2.457517 \text{KJ/lb °F}$

$F_{ao} = 393.4\ lbmol/h$

$T_a = 384\,°\text{F}$

Para el cálculo del coeficiente global de transferencia de calor, U_T, tenemos la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

Donde $h_c = \frac{Nu\ k}{L}$, dx_i = espesor de *i*, *k* = conductividad térmica de *i*, *i*, representa el material del equipo.

Para hallar h_c:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,3037 BTU/ lb F; μ = 0,1267 lb/h ft ; n =0,3(turbulento)

k= 0,0455 BTU/h ft^2 F

$\text{Pr} = 0{,}845316$

$Re = \frac{G_T D_C}{\mu}$; $D_C = 0.99\,pu\,\text{lg} = 0.0825\,ft$ (kern, fig 28) $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$

$$\text{a}_\text{t} = \frac{\text{DI} \times \text{C}' \times \text{B}}{144\text{P}_\text{T}} = \frac{44.25 \times 0{,}75}{144 \times 0.23} = 1{,}0020 \text{ft}^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{106505.2 lb/h}{1{,}0020\,ft^2} = 101516.705 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\text{Re} = \frac{\text{G}_\text{T} D}{\mu} = \frac{(1101516.705 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0825\,ft)}{0{,}1267 \frac{lb}{h\ ft}} = 179492.673$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 335.7984$

$h_c = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =335.7984; k= 0.0455 BTU/h pie F; L= 15 ft

$h_c = 0.35393154$

Para hallar h_f:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,2514 BTU/ lb F; μ = 0,04666 lb/h ft; k= 0,01581 BTU/h pie F

$n = 0.3$ (régimen turbulento)

$\mathrm{Pr} = 0.74195598$

$Re = \frac{G_T D}{\mu}$; $D = 0.99\,pu\,\mathrm{lg} = 0.0825\,ft$ (kern, fig 28) $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$

$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$; $a_t = 0.836\,pu\,\mathrm{lg}^2$ (kern, tabla 10)

$a_t = \frac{0.836 \times 950}{57.65 \times 144} = 0.06145833\,ft^2$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{101723.6 lb/h}{0.06145833\,ft^2} = 1655163.66 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(1655163.66 \frac{lb}{ft^2 h})(0.0825\,ft)}{0{,}04666 \frac{lb}{h\ ft}} = 2926510.97$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 3132.71872$

$h_f = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu = 3132.71872; k= 0.01581 BTU/h pie F; L= 15 ft

$h_f = 3.30188554$

Hallamos ahora sí, el coeficiente global de transferencia de calor:

Asumiendo que la conductividad del material es muy

dx_i =0,0208 ft, espesor del equipo

k = 9,41796404417776 conductividad térmica del material del equipo.

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

U_T = 0.34911 BTU /h ft^2 F

Al reemplazar los valores en la ecuación, para hallar T quedaría:

$T = 1203.8499°F$

Filtro de platino NAN-1

i. Tipo de filtro : De platino
ii. Material Reactor y material filtrante: Acero inoxidable 304 y fibra cerámica.
iii. Dimensiones: 13.12 ft altura y 4.725 ft diámetro.
iv. Cálculos:

Con los datos de entrada de Flujo de entrada (F_{in}), la concentración (X), y la fracción de remoción (Xrr), se obtienen los flujos de salida y filtrado, reales, mediante las ecuaciones planteadas en los modelos:

F-in	95250
X	0.0063
F-out (calculado)	94649.925
F-filtrado (calculado)	600.075
Fracción removida (Xrr)	0.98
F-out real	94661.9265
F-filtrado real	588.0735

Intercambiador de calor

i. Tipo de Intercambiador : Tubo y coraza
ii. Material: Acero inoxidable 321
iii. Dimensiones: 10 ft altura
3.5 ft Diámetro
0.05108 ft Diámetro interno

		Propiedades	Entrada	Salida
Tubos	**Gas de proceso**	Flujo másico (lb/hr)	119659	119659
		Temperatura (°F)	1201	1033
		Presión (PSIG)	113	110
Coraza	**Aire**	Flujo másico (lb/hr)	101452	101452
		Temperatura (°F)	364	577
		Presión (PSIG)	123	120

iv. Área de transferencia: 538 ft^2

v. CALCULOS

Para el cálculo del coeficiente global de transferencia de calor, U_T, tenemos la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

Donde $h_f = \frac{Nu\ k}{L}$, dx_i = espesor de *i*, *k* = conductividad térmica de *i*, *i*, representa el material del equipo.

Para hallar h_f:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,2755 BTU/ lb F; μ = 0,1062 lb/h ft ; n =0,3(turbulento)

k= 0,03576 BTU/h ft^2 F

$\Pr = 0{,}818179$

D = 1,33 pulg = 0,110833 ft (tabla 10. Kern); μ = 0,1062 lb/h ft

$Re = \frac{G_T D}{\mu}$; $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$; $a_t = 0{,}546\, pu\lg^2 (\text{kern, tabla } 10)$

$$a_t = \frac{0{,}546 \times 137}{3{,}45347 \times 144} = 0{,}39525463\, ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{119659 lb/h}{0{,}39525463\, ft^2} = 302739.023 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(288713{,}06\,\frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0695\,ft)}{0{,}09752\,\frac{lb}{h\ ft}} = 205758.38 \text{ (Régimen turbulento)}$$

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = \ 374{,}218603$

$h_f = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =374,218603; k= 0,03576 BTU/h pie F; L= 20 ft

$h_f = \ 0.6691029$

Para hallar h_c:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,2514 BTU/ lb F; μ = 0,06727 lb/h ft; k= 0,02304 BTU/h pie F ;

$n = 0.3$ (régimen turbulento)

$\mathrm{Pr} = \ 0{,}7340138$

$Re = \frac{G_T D_C}{\mu}$; $D_C = 0.99\,pu\,\mathrm{lg} = 0.0825\,ft$ (kern, fig 28) $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$

$$a_t = \frac{DI \times C' \times B}{144 P_T} = \frac{32 \times 0{,}00075}{144 \times 6} = 0{,}000027778\,ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{101452 lb/h}{0{,}000027778\,ft^2} = 3652272000\,\frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(3652272000\,\frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0825\,ft)}{0{,}06727\,\frac{lb}{h\ ft}} = 4479150290 \text{ (Régimen turbulento)}$$

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = \ 1102543{,}191$

$h_c = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =1102543,191; k= 0, 02304 BTU/h pie F; L= 20 ft

h_c = 1270,1298

Hallamos ahora sí, el coeficiente global de transferencia de calor:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

U_T = 0.6687506 BTU /h ft^2 F

Caldera de vapor residual WHB-102A

i. Tipo: Tubo y coraza

Material: Coraza: Acero al carbón

Tubos: acero inoxidable 430

ii. Dimensiones: 20 ft largo
3.42 ft Diámetro

		Propiedades	**Entrada**	**Salida**
Tubos	**Gas de proceso**	Flujo másico (lb/hr)	59829.5	59829.5
		Temperatura (°F)	1033	610
		Presión (PSIG)	110	109
Coraza	**Agua**	Flujo másico (lb/hr)	33000	33000
		Temperatura (°F)	383	742
		Presión (PSIG)	123	120

iii. Área de transferencia: 3370 ft^2

iv. CALCULOS

Para el cálculo de los coeficientes globales de transferencia de calor, U_T y U_c, para tubos y coraza respectivamente, tenemos las siguientes ecuaciones:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f}$$

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{h_c}$$

Donde $h_f = \frac{Nu_f\, k}{L}$ y $h_c = \frac{Nu_c\, k}{L}$

Para hallar h_f:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,2691 BTU/ lb F; μ = 0,1012 lb/h ft ; n =0,3(turbulento)

k= 0,0342 BTU/h ft^2 F

$\Pr = 0{,}79628421$

D = 0,834 pulg = 0,0695 ft (tabla 10. Kern); μ = 0,1012 lb/h ft

$Re = \frac{G_T D}{\mu}$; $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$; $a_t = 0{,}546\, pu\lg^2 (\text{kern, tabla } 10)$

$$a_t = \frac{0{,}546 \times 650}{1{,}5558826 \times 144} = 1{,}58404197\ ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{119659 lb/h}{1{,}58404197\ ft^2} = 75540.2966 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(75540.2966 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0695\, ft)}{0{,}1012 \frac{lb}{h\ ft}} = 51877.9705$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 127.067548$

$h_f = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =127.067548; k= 0, 0342 BTU/h pie F; L= 20 ft

$h_f = 0{,}21728551$

Para hallar h_c:

$$Nu_L = \frac{Ja^2}{C_{sf}}.\Pr.m$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0.2495 BTU/ lb F; μ = 0.06367 lb/h ft; k= 0,0269 BTU/h pie F ;

$\Pr = 0.59054517$

$Ja = \frac{C_p \Delta T}{h_{fg}}$; C_p= 0.2495 BTU/ lb F; ΔT= 821 °F, h_{fg}= 973.66 BTU/ lb

Ja = 0.2103

C_{sf} = 0.0132

m = 2

$$\mathrm{Re}_D = \frac{G_T D}{\mu};$$

$$Re = \frac{G_T D_C}{\mu}; D_C = 0{,}99\,pu\,\mathrm{lg} = 0{,}0825\,ft \text{ (kern, fig 28)}\; G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$$

$$a_t = \frac{DI \times C' \times B}{144 P_T} = \frac{39 \times 0{,}00075}{144 \times 6} = 0{,}000033854\,ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{33000 lb/h}{0{,}000033854\,ft^2} = 974769231 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{\mathrm{G_T} D}{\mu} = \frac{(974769231 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0825\,ft)}{0{,}06367 \frac{lb}{h\ ft}} = 1263051069$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = \ 3.96018$

$h_c = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu = 3.96018; k= 0, 0269 BTU/h pie F; L= 20 ft

$h_c = \ 0.0053$

Hallamos ahora sí, los coeficientes globales de transferencia de calor:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f}$$

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{h_c}$$

U_T = 0.21728551

U_c = 0.0053

Caldera de Vapor Residual WHB-102B

i. Tipo: Tubo y coraza
ii. Material: Coraza: Acero al carbón
Tubos: acero inoxidable 430
iii. Dimensiones: 20 ft largo
3.42 ft Diámetro

		Propiedades	**Entrada**	**Salida**
Tubos	**Gas de proceso**	Flujo másico (lb/hr)	59829.5	59829.5
		Temperatura (°F)	1033	610
		Presión (PSIG)	110	109
Coraza	**Aire**	Flujo másico (lb/hr)	33000	33000
		Temperatura (°F)	383	742
		Presión (PSIG)	123	120

v. Área de transferencia: 3370 ft^2
vi. CALCULOS

Para el cálculo de los coeficientes globales de transferencia de calor, U_T y U_c, para tubos y coraza respectivamente, tenemos las siguientes ecuaciones:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f}$$

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{h_c}$$

Donde $h_f = \frac{Nu_f\, k}{L}$ y $h_c = \frac{Nu_c\, k}{L}$

Para hallar h_f:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,2622 BTU/ lb F; μ = 0,084 lb/h ft ; n =0,3(turbulento)

k= 0,02825 BTU/h ft^2 F

$\mathrm{Pr} = 0{,}77963894$

D = 0,834 pulg = 0,0695 ft (tabla 10. Kern); $\mu = 0{,}08827$ lb/h ft

$Re = \frac{G_T D}{\mu}$; $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$; $a_t = 0{,}546\, pu\,\mathrm{lg}^2\,(\text{kern, tabla } 10)$

$$a_t = \frac{0{,}546 \times 650}{2.46587 \times 144} = 0.99947821\, ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{119659 lb/h}{0.99947821\, ft^2} = 119721.469 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(119721.469 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0695\, ft)}{0.084 \frac{lb}{h\ ft}} = 99055.2634$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = \ 211.835108$

$h_f = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =211.835108; k= 0, 02825 BTU/h pie F; L= 20 ft

$h_f = \ 0.29921709$

Para hallar h_c:

$$Nu_L = \frac{Ja^2}{C_{sf}}.\mathrm{Pr.m}$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0.2446 BTU/ lb F; $\mu = 0.05157$ lb/h ft; k= 0,01715 BTU/h pie F ;

$\mathrm{Pr} = \ 0.73551149$

$Ja = \frac{C_p \Delta T}{h_{fg}}$; C_p= 0.2446 BTU/ lb F; ΔT= 821° F, h_{fg}= 973.66 BTU/lb

C_{sf} = 0.0132

m = 2

$Re = \frac{G_T D_C}{\mu}$; $D_C = 0{,}99\,pu\,\text{lg} = 0{,}0825\,ft$ (kern, fig 28) $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$

$$a_t = \frac{DI \times C' \times B}{144 P_T} = \frac{39 \times 0{,}00075}{144 \times 6} = 0{,}000033854\,ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{33000 lb/h}{0{,}000033854\,ft^2} = 974769231 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\text{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(974769231 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0825\,ft)}{0{,}05157 \frac{lb}{h\ ft}} = 1559403947$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 4.7405$

$h_c = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =4.7405 ; k= 0, 01715 BTU/h pie F; L= 20 ft

$h_c = 0.00406$

Hallamos ahora sí, los coeficientes globales de transferencia de calor:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f}$$

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{h_c}$$

U_T = 0.29921709

U_c = 0.00406

Cooler Condenser

i. Tipo: Tubo y coraza
ii. Material: Acero inoxidable 430
iii. Dimensiones: : 42 ½" x 34´10 ¼" largo

		Propiedades	**Entrada**	**Salida**
Tubos	**Gas de proceso**	Flujo másico (lb/hr)	119659	119659
		Temperatura (°F)	610	110

		Presión (PSIG)	107	107
Coraza	**Aire**	Flujo másico (lb/hr)	140739	140739
		Temperatura (°F)	165	456
		Presión (PSIG)	106	107

iv. Área de transferencia: 7270 ft^2

v. CALCULOS

Para el cálculo del coeficiente global de transferencia de calor, U_T, tenemos la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

Donde $h_f = \frac{Nu\ k}{L}$, dx_i = espesor de *i*, *k* = conductividad térmica de *i*, *i*, representa el material del equipo.

Para hallar h_f:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0.2836 BTU/ lb F; $\mu = 0.05707$ lb/h ft ; n =0,3(turbulento)

k= 0.02134 BTU/h ft^2 F

$\Pr = 0{,}7584373$

D = 0,834 pulg = 0,0695 ft (tabla 10. Kern); $\mu = 0{,}05707$ lb/h ft

$Re = \frac{G_T D}{\mu}$; $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$; $a_t = 0{,}546\, pu\lg^2 (\text{kern, tabla } 10)$

$$a_t = \frac{0{,}0695 \times 360}{1.981 \times 144} = 0.68904594\, ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{119659 lb/h}{0.68904594\, ft^2} = 173658.959 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(173658.959 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0695\, ft)}{0.05707 \frac{lb}{h\ ft}} = 211482.349$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 385.410056$

$h_f = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =385.410056; k= 0, 02134 BTU/h pie F; L= 20 ft

$h_f = 0.41123253$

Para hallar h_c:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 1.042 BTU/ lb F; $\mu = 0.7986$ lb/h ft; k= 0.3888 BTU/h pie F ;

$n = 0.3$ (régimen turbulento)

$\mathrm{Pr} = 2.140280864$

$Re = \frac{G_T D_C}{\mu}$; $D_C = 0{,}99\,pu\,\mathrm{lg} = 0{,}0825\,ft$ (kern, fig 28) $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$

$$a_t = \frac{DI \times C' \times B}{144 P_T} = \frac{32 \times 0{,}00075}{144 \times 6} = 0{,}000027778\,ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{600000 lb/h}{0{,}000027778\,ft^2} = 21600000000\,\frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(21600000000\,\frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0825\,ft)}{0.7986\,\frac{lb}{h\ ft}} = 2231404958.68$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 870425.8528$

$h_c = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =870425.8528; k= 0.3888BTU/h pie F; L= 20 ft

$h_c = 16921.0786$

Hallamos ahora sí, el coeficiente global de transferencia de calor:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

U_T = 0.41122254 BTU /h ft^2 F

Torre de absorción

i. Tipo de Torre de absorción : Capucha con enfriamiento
ii. Material: Acero inoxidable 340L
iii. Dimensiones: 48 ft altura – 24 ft altura
11 ft Diámetro

ENTRADA		
Gases de proceso desde el condensador		
	LB/H	LB-MOL/H
O_2	4976.0	155.5
N_2	76129.2	2718.9
NO	6468	215.6
NO_2	7268	158
N_2O_4		0.00
HNO_3	88.2	1.4
H_2O	11664.0	648.0
TOTAL	106593.40	3897.40
T(°F)	110	

iv. Cálculos
Para realizar los caculos para hallar la variación de la temperatura, descrita por la siguiente ecuación:

$$\Delta T = [(6.2x10^3\ X\ G_{NO}) + 2.845x10^4(G'_{N2O4} - G_{N2O4}]/G_{gas}C_{gas}$$

es necesario saber:

- G_{NO} = Flujo molar de NO en gas de alimentación (kmol/s)
- G'_{N2O4}= flujo molar de N_2O_4 después de la oxidación (kmol/s)
- G_{N2O4}= flujo molar de N_2O_4 antes de la oxidación (kmol/s)
- G_{gas} = Caudal molar de la mezcla total del gas (kmol/s)
- C_{gas}= promedio de C_p de la mezcla de gases (J/kmol K)

En la corriente de alimentación al plato numero 1, se tiene que:

G_{NO} = 0.0272 kmol/s

G_{N2O4}=0.008633 kmol/s

Para calcular el flujo molar de N_2O_4 después de la oxidación, es necesario calcular

$$k_1 t P^2 = (b-a)^{-2}\left\{[X(b-a)/(1-X)b] - Ln\left[(1-X)/(1-\left(\frac{aX}{k1}\right))\right]\right\}$$

Donde:

- k_1= Constante de velocidad, obtenida de: $\log k_1 = \left[\left(\frac{635}{T}\right) - 1.0261\right]$; Para T= 110°F = 316.38 K
  k_1= $e^{[(\frac{635}{T})-1.0261]} = e^{[(\frac{635}{31648})-1.0261]} = 2.66537805$
- t = tiempo de residencia en el espacio de oxidación (segundos)
  t=0.05 s
- P= presión de operación (bar)
  P=100 psig = 6.89 bar
- b = fracción molar inicial de O2 en el gas
  b =0.07006528
- 2a = fracción molar inicial de NO en el gas;
  2a= 0.0133459501
- T = temperatura del gas (K) = 316.48 K
- X = fracción de NO oxidado adicionalmente = 0.16133

$G´_{N2O4}$= 0.00139277 Kmol/s

G_{gas} = 0.55818 Kmol/s

C_{gas}= $\frac{d}{a}Cp_D + \frac{c}{a}Cp_C - \frac{b}{a}Cp_B - Cp_A$

C_{gas}= $-0.019151\ KJ/Kmol\ °K$

$$\Delta T = -258.9\ K = -5.8°F$$

Para calcular el flujo de acido nítrico formado en el plato 1:

$$F_a = \left[p_{NO} + p_{NOX} - \frac{k3E^3 + 2E^2}{k2 + E}\right](\ G_{NO} + \ G_{NOX})\ C(p_{NO} + p_{NOX})^{-1}$$

- p_{NO} = presión parcial de NO = 4.65 psig
- p_{NOX} = presión parcial de NO_2 + N_2O_4=9.7649331 psig
- k_2 = Constante de equilibrio NO_2/N_2O_4 (Bodenstein)

$$k_2 = \frac{p^2{}_{NO2}}{p_{N2O4}} = 10^{(8.756-\frac{2838}{T})}\left[1-\left[(T/210.3)+\left(\frac{790}{T}\right)-(3.8794)\right]p_{NOX}\right]$$

$$= A[1 - Bp_{NOX}]$$

$$k_2 = \frac{p^2{}_{NO2}}{p_{N2O4}} = \frac{(5.233790289)^2}{4.53114281} = 6.04539$$

- k_4 = constante de equilibrio NO/N_2O_4, hallada por:

$$\log k4 = 7.412 - 20.28921W + 32.47322W^2 - 30.87W^3$$

Donde, W= concentración de acido presente en el plato;

- $k_3 = k_4/k_2$
- E= Presión parcial de equilibrio de NO_2, determinada por:

$$3k_3E^3 + \left(\frac{2E^2}{k_2}\right) + E = 3p_{NO} + p_{NOX}$$

- C =Grado de aproximación al equilibrio (eficiencia del plato)
- F_a= moles de acido formado

F_a= 367.5 lbmol/h

De manera más sintetizada, los cálculos se realizan de la misma manera para los platos de las torres de NAN1. Al estar las dos torres de absorción en serie, se pueden contar los platos desde el número 1 hasta el plato 49. (torre 1= 35 platos y torre 2=14 platos). Se muestran los datos arrojados para los platos mas significativos plato 1 y plato 49.

PLATO 1		
	LB/H	LB-MOL/H
O_2	10918.4	341.2
N_2	95894.4	3424.8
NO	6468	215.6
NO_2	7268	158
N_2O_4	6292.26	65.54
HNO_3	88.2	1.4
H_2O	11937.6	663.2
TOTAL	138866.86	4869.74
T(°F)	108.3	

Ácido saliente Plato 1			
	LB/HR	WT%	LB-MOL/H
HNO_3	23152.5	53.5770072	367.5
H_2O	18864	43.6530251	1048
N2O4	1197	2.76996772	13.01
Total	43213.5	100	1428.51

Para el plato 49, se tiene que:

PLATO 49		
	LB/H	LB-MOL/H
O_2	5767.65347	180.239171
N_2	95894.4	3424.8
NO	163.716209	5.45720698
NO_2	60.6358857	1.31817143
N_2O_4	0.76421946	0.00830673
HNO_3	0	0
H_2O	15509.8118	861.656213
TOTAL	117396.982	4473.47907
T(°F)	94.8	

Ácido saliente Plato 49			
	LB/H	WT%	LB-MOL/H
HNO_3	18	0.266	0.28571429
H_2O	6746.617	99.7	374.81203
N_2O_4	2.301	0.034	0.02500817
Total	6766.917293	100	375.122753

NAN-2

Orden de los equipos de la planta:

- Compresor
- Turbina
- Filtro de aire
- Filtro de amoníaco
- Reactor
- Filtro de platino

- Intercambiador de calor
- Caldera de vapor residual
- Caldera de vapor residual
- Cooler Condenser (enfriador)
- Torre de Absorción

Filtro de aire NAN-2

v. Tipo de filtro : De aire
vi. Material Reactor y material filtrante: Acero carbón y lana de vidrio.
vii. Dimensiones: 13.12 ft altura y 4.725 ft diámetro.
viii. Cálculos:

Con los datos de entrada de flujo de entrada (F_{in}), la concentración (X), y la fracción de remoción (Xrr), se obtienen los flujos de salida y filtrado, reales, mediante las ecuaciones planteadas en los modelos, presentadas a continuación:

$$F_{filtrado} = X.(F_{in})$$

$$F_{filtrado.real} = F_{filtrado}(X_{rr}) = X(F_{in})(X_{rr})$$

$$F_{out.real} = F_{out} + (F_{filtrado} - F_{filtradoreal})$$

F-in	157242
X	0.00561
F-out (100%)	156359.872
F-filtrado (100%)	882.12762
Fracción removida (Xrr)	0.98
F-out real	156377.515
F-filtrado real	864.485068

Filtro de amoníaco NAN-2

i. Tipo de filtro : De amoníaco
ii. Material Reactor y material filtrante: Acero carbón e inoxidable 304 y lana de vidrio.
iii. Dimensiones: 13.12 ft altura y 4.725 ft diámetro.
iv. Cálculos:

Partiendo de los datos de entrada de flujo de entrada (F_{in}), la concentración (X), y la fracción de remoción (Xrr), se obtienen los flujos de salida y filtrado, reales, mediante las ecuaciones planteadas en los modelos:

F-in	9768
X	0.0045
F-out (100%)	9724.044
F-filtrado (100%)	43.956
Fracción removida (Xrr)	0.99
F-out real	9724.48356
F-filtrado real	43.51644

Reactor

i. Tipo de Reactor : PBR
ii. Material Reactor y Gasa: Acero inoxidable 321 y Platino rodio (90:10)
iii. Dimensiones: 15 ft altura
5.25 ft Diámetro

	Propiedades	Agua	NH3	O2	N2
Entrada	Flujo másico (lb/hr)	1755	9671	35446	116736
	Temperatura (°F)	550	550	550	550
	Presión (PSIG)	120	175	120	120

	Propiedades	Agua	NO +NO2	O2	N2
Salida	Flujo másico (lb/hr)	17099	15676	13460	117373
	Temperatura (°F)	1201	1201	1201	1201
	Presión (PSIG)	113	113	113	113

iv. Cálculos

Partiendo de la reacción de interés que ocurre a las condiciones dadas y del balance de moles para un reactor PBR tenemos:

$$4NH_3 + 5O_2 \rightarrow 4NO + 6H_2O$$

$$F_{A0}\frac{dX}{dW} = -r'_A$$

Para la velocidad de reacción tenemos:

$$r'_A = K[NH_3]^{0.36}[O_2]^{0.14}$$

Donde K es la constante de velocidad, dada por la ecuación de Arrhenius:

$$K = A \cdot e^{\frac{-Ea}{RT}}$$

Donde A es el denominado factor preexponencial y E es la energía de activación de la reacción, R es la constante de los gases y "T" es la temperatura en grados K.

Parámetros:

$$A = 3.5x10^{20}$$

$$E_a = 523754\,\text{J/mol}$$

$$R = 8.3143\,\text{J/K} \cdot \text{mol}$$

$$T = 1199.83K$$

Con estos valores calculamos la constante de velocidad K para luego obtener el valor de la velocidad reacción.

$$K = 5.52608\text{x}10^{-3}$$

Con este valor de K y las concentraciones de NH_3 y O_2 calculamos la velocidad de reacción:

$$r'_A = 1.8759\text{x}10^{-3}$$

Balance de energía:

El balance de energía, en el reactor esta dado por el balance de energía para un reactor no isotérmico empacado (PBR) en estado estacionario con cambiador de calor. El flujo de calor $\Delta\dot{Q}$, se da en términos del coeficiente total de transferencia de calor U; el área de intercambio de calor a y la diferencia entre la temperatura del refrigerante T_a y la temperatura del reactor, T.

Está dado por la siguiente expresión:

$$\frac{dT}{dW} = \frac{\frac{U_a}{\rho_a}(T_a - T) + r'_A \Delta H_{RX}(T)}{F_{ao}(\sum \Theta_i C_p + \Delta C_p X)} \tag{29}$$

Donde U_a es el coeficiente global de calor, ρ_b es la densidad de bulto ΔH_{RX} es el calor de reacción, F_{ao} es el flujo molar inicial de amoniaco, θ_i es moles i/moles a, C_P es la capacidad calorífica y X es la conversión del reactor.

Donde el calor de reacción a la temperatura T, ΔHrx(T) se halla mediante la siguiente ecuación:

$$\Delta H_{Rx}(T) = \frac{d}{a}H_D(T) + \frac{c}{a}H_C(T) - \frac{b}{a}H_B(T) - H_A(T)$$

Para este caso los H y Cp para cada compuesto serían:

	Entalpía H (KJ/Kmol)	*Calor específico Cp (KJ/(lb.°f))*	$\Theta_{\theta i}$
NH_3	2170	0.8898925	1
O_2	2.953x10^4	0.2794695	1.25
NO	1.194x10^5	0.293712	1
H_2O	-2.068x10^5	0.607047	1.25

Los demás términos constantes se hallan con las siguientes ecuaciones:

$\Delta Cp = \frac{d}{a}Cp_D + \frac{c}{a}Cp_C - \frac{b}{a}Cp_B - Cp_A$; $\Delta Cp = -0.0279575\ KJ/lb\ °f$

$X = Conversion = 93.5\%$

$\rho_b = \frac{r_a}{r'_a}$; $\rho_b =$ 0.847835443 lb/ft^3

$r_a = Vel.de\ reaccion\ en\ funcion\ del\ volumen\ del\ reactor$

$r'_a = Vel.\,de\ reaccion\ en\ funcion\ de\ la\ masa\ del\ catalizador$

$\sum \theta_i c_p = \ 2.44351188 \mathrm{KJ/lb\ °f}$

$F_{ao} = 567.8\ lbmol/h$

Para el cálculo del coeficiente global de transferencia de calor, U_T, tenemos la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

Donde $h_c = \frac{Nu\ k}{L}$, dx_i = espesor de *i*, *k* = conductividad térmica de *i*, *i*, representa el material del equipo.

Para hallar h_c:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,3023 BTU/ lb F; μ = 0,1265 lb/h ft ; n =0,3(turbulento)

k= 0,0453 BTU/h ft^2 F

$\mathrm{Pr} = \ 0{,}843799$

$Re = \frac{G_T D_C}{\mu}$; $D_C = 0.99\,pu\,\mathrm{lg} = 0.0825\,ft$ (kern, fig 28) $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$

$$\mathrm{a_t} = \frac{\mathrm{DI} \times \mathrm{C'} \times \mathrm{B}}{144 \mathrm{P_T}} = \frac{44.25 \times 0{,}75}{144 \times 0.312} = 0.738681 \mathrm{ft}^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{163608 lb/h}{0.738681\,ft^2} = 190527.21 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{\mathrm{G_T} D}{\mu} = \frac{(190527.21 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0825\,ft)}{0{,}1265 \frac{lb}{h\ ft}} = 259638.171 \ \text{(Régimen turbulento)}$$

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = \ 450.486$

$h_c = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =450.486 ; k= 0.0453 BTU/h pie F; L= 15 ft

$h_c = 0.0630980$

Para hallar h_f:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,2562 BTU/ lb F; μ = 0,06054 lb/h ft; k= 0,02101 BTU/h pie F ;

$n = 0.3$ (régimen turbulento)

$\mathrm{Pr} = 0.73823646$

$Re = \frac{G_T D}{\mu}$; $D = 0.99\,pu\,\mathrm{lg} = 0.0825\,ft$ (kern, fig 28) $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$

$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$; $a_t = 0.836\,pu\,\mathrm{lg}^2$ (kern, tabla 10)

$a_t = \frac{0.836 \times 950}{57.65 \times 144} = 0.06145833\,ft^2$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{140739 lb/h}{0.06145833\,ft^2} = 2289990.51 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(2289990.51 \frac{lb}{ft^2 h})(0.0825\,ft)}{0{,}06054 \frac{lb}{h\ ft}} = 3120651.09$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 3292.93228$

$h_f = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu = 3292.93228; k= 0.06054 BTU/h pie F; L= 15 ft

$h_f = 4.61229894$

Hallamos ahora sí, el coeficiente global de transferencia de calor:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

U_T = 0.619817503 BTU /h ft^2 F

Teniendo los valores, se reemplazan en la ecuación de T:

$$T = 1201.8516°F$$

Filtro de platino NAN-2

i. Tipo de filtro : De platino
ii. Material Reactor y material filtrante: Acero inoxidable 304 y fibra cerámica.
iii. Dimensiones: 13.12 ft altura y 4.725 ft diámetro.
iv. Cálculos:

Con los datos de entrada de Flujo de entrada (F_{in}), la concentración (X), y la fracción de remoción (Xrr), se obtienen los flujos de salida y filtrado, reales, mediante las ecuaciones planteadas en los modelos:

F-in	121450
X	0.0063
F-out (100%)	120684.865
F-filtrado (100%)	765.135
fracción removida (Xrr)	0.98
F-out real	120700.168
F-filtrado real	749.8323

Intercambiador de calor E-815

i. Tipo de Intercambiador : Tubo y coraza
ii. Material: Acero inoxidable 321
iii. Dimensiones: 10 ft altura
27 Diámetro
0.05108 ft Diámetro interno

		Propiedades	Entrada	Salida
Tubos	**Gas de proceso**	Flujo másico (lb/hr)	163608	163608
		Temperatura (°F)	1201	1031
		Presión (PSIG)	113	110

Coraza	**Aire**	Flujo másico (lb/hr)	153888	153888
		Temperatura (°F)	364	584
		Presión (PSIG)	123	120

iv. Área de transferencia: 538 ft^2

v. CALCULOS

Para el cálculo del coeficiente global de transferencia de calor, U_T, tenemos la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

Donde $h_f = \frac{Nu\ k}{L}$, dx_i = espesor de *i*, *k* = conductividad térmica de *i*, *i*, representa el material del equipo.

Para hallar h_f:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,2998 BTU/ lb F; μ = 0,107 lb/h ft ; n =0,3(turbulento)

k= 0,03761 BTU/h ft^2 F

$\Pr = 0{,}852927412922095$

D = 1,33 pulg = 0,110833 ft (tabla 10. Kern); μ = 0,107 lb/h ft

$Re = \frac{G_T D}{\mu}$; $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$; $a_t = 1{,}4\ pu\lg^2 (\text{kern, tabla } 10)$

$$a_t = \frac{1{,}4 \times 137}{1 \times 144} = 1{,}331\ ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{163608 lb/h}{1{,}331\ ft^2} = 122921 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(122921 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}1100833\ ft)}{0{,}107 \frac{lb}{h\ ft}} = 127324$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 266{,}0302$

$h_f = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =266,0302 ; k= 0, 03761 BTU/h pie F; L= 10 ft

$h_f = 1{,}00054$

Para hallar h_c:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,8 BTU/ lb F; μ = 0,03 lb/h ft; k= 0,0226 BTU/h pie F ;

$n = 0.3$ (régimen turbulento)

$\mathrm{Pr} = 1{,}06194690265487$

$Re = \frac{G_T D_C}{\mu}$; $D_C = 1{,}08\,pu\,\mathrm{lg} = 0{,}09\,ft$ (kern, fig 28) $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$

$$a_t = \frac{DI \times C' \times B}{144 P_T} = \frac{27 \times 0{,}75}{144 \times 3{,}75} = 0{,}00375\,ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{153888\,lb/h}{0{,}00375\,ft^2} = 41036800\,\frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(41036800\,\frac{lb}{ft^2 h})(0{,}09\,ft)}{0{,}03\,\frac{lb}{h\ ft}} = 123110400$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 69888{,}4$

$h_c = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =69888,4; k= 0, 0226 BTU/h pie F; L= 10 ft

$h_c = 157{,}948$

Hallamos ahora sí, el coeficiente global de transferencia de calor:

dx_i =0,0208 ft, espesor del equipo

k = 9,41796404417776 conductividad térmica del material del equipo.

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

U_T = 0.994242 BTU /h ft^2 F

Caldera de vapor residual B-801

I. Tipo: Tubo y coraza
II. Material: Coraza: Acero al carbón

Tubos: acero inoxidable 430

III. Dimensiones: 20 ft largo
3.42 ft Diámetro

		Propiedades	Entrada	Salida
Tubos	**Gas de proceso**	Flujo másico (lb/hr)	163608	163608
		Temperatura (°F)	1031	533
		Presión (PSIG)	110	109
Coraza	**Aire**	Flujo másico (lb/hr)	33000	33000
		Temperatura (°F)	383	976
		Presión (PSIG)	123	120

IV. Área de transferencia: 3370 ft^2
V. CALCULOS

Para el cálculo del coeficiente global de transferencia de calor, U_T, tenemos la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

Donde $h_f = \frac{Nu\ k}{L}$, dx_i = espesor de *i*, *k* = conductividad térmica de *i*, *i*, representa el material del equipo.

Para hallar h_f:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,2863 BTU/ lb F; μ = 0,09224 lb/h ft ; n =0,3(turbulento)

k= 0,03414 BTU/h ft^2 F

$\Pr = 0{,}7735299$

D = 0,834 pulg = 0,0695 ft (tabla 10. Kern); $\mu = 0{,}09224$ lb/h ft

$Re = \frac{G_T D}{\mu}$; $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$; $a_t = 0{,}546\, pu\,\lg^2 (\text{kern, tabla } 10)$

$$a_t = \frac{0{,}546 \times 650}{6.14 \times 144} = 0{,}4013979\, ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{163608 lb/h}{0{,}4013979\, ft^2} = 407595.5 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(407595.5 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0695\, ft)}{0{,}09224 \frac{lb}{h\ ft}} = 307110.6$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 522.52$

$h_f = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =522.52; k= 0, 03414 BTU/h pie F; L= 20 ft

$h_f = 0.89195$

Para hallar h_c:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 1,157 BTU/ lb F; $\mu = 0{,}386$ lb/h ft; k= 0,3323 BTU/h pie F ;

$n = 0.3$ (régimen turbulento)

$\Pr = 1{,}3439723$

$Re = \frac{G_T D_C}{\mu}$; $D_C = 0{,}99\, pu\,\lg = 0{,}0825\, ft$ (kern, fig 28) $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$

$$a_t = \frac{DI \times C' \times B}{144 P_T} = \frac{39 \times 0{,}00075}{144 \times 6} = 0{,}000033854\, ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{33000 lb/h}{0{,}000033854\, ft^2} = 974769231 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(974769231 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0825\, ft)}{0{,}386 \frac{lb}{h\ ft}} = 208337983$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = \ 113568{,}97$

$h_c = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =113568,97; k= 0, 3323 BTU/h pie F; L= 20 ft

$h_c = 1886{,}9485$

Hallamos ahora sí, el coeficiente global de transferencia de calor:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

U_T = 0.8915284 BTU /h ft^2 F

Caldera de vapor residual B-801

I. Tipo: Tubo y coraza
II. Material: Coraza: Acero al carbón

Tubos: acero inoxidable 430

III. Dimensiones: 20 ft largo
3.42 ft Diámetro

		Propiedades	Entrada	Salida
Tubos	**Gas de proceso**	Flujo másico (lb/hr)	163608	163608
		Temperatura (°F)	1031	533
		Presión (PSIG)	110	109
Coraza	**Aire**	Flujo másico (lb/hr)	33000	33000
		Temperatura (°F)	383	976
		Presión (PSIG)	123	120

IV. Área de transferencia: 3370 ft^2

V. CALCULOS

Para el cálculo de los coeficientes globales de transferencia de calor, U_T y U_c, para tubos y coraza respectivamente, tenemos las siguientes ecuaciones:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f}$$

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{h_c}$$

Donde $h_f = \frac{Nu_f\, k}{L}$ y $h_c = \frac{Nu_c\, k}{L}$

Para hallar h_f:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$$= 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,2863 BTU/ lb F; μ = 0,09224 lb/h ft ; n =0,3(turbulento)

k= 0,03414 BTU/h ft^2 F

$\Pr = 0{,}7735299$

D = 0,834 pulg = 0,0695 ft (tabla 10. Kern); μ = 0,09224 lb/h ft

$Re = \frac{G_T D}{\mu}$; $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$; $a_t = 0{,}546\, pu\,\mathrm{lg}^2\,(\text{kern, tabla } 10)$

$$a_t = \frac{0{,}546 \times 650}{6.14 \times 144} = 0{,}4013979\, ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{163608 lb/h}{0{,}4013979\, ft^2} = 407595.5 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(407595.5 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0695\, ft)}{0{,}09224 \frac{lb}{h\ ft}} = 307110.6$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 522.52$

$h_f = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =522.52; k= 0, 03414 BTU/h pie F; L= 20 ft

$h_f = 0.89195$

Para hallar h_c:

$$Nu_L = \frac{Ja^2}{C_{sf}}.\mathrm{Pr.m}$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 1,157 BTU/ lb F; μ = 0,386 lb/h ft; k= 0,3323 BTU/h pie F ;

$\mathrm{Pr} = 1{,}3439723$

$Ja = \frac{C_p \Delta T}{h_{fg}}$; C_p= 1,157 BTU/ lb F; ΔT= 819 °F, h_{fg}= 973.66 BTU/lb

C_{sf} = 0.0132

m = 2

$Re = \frac{G_T D_C}{\mu}$; $D_C = 0{,}99\,pu\,\mathrm{lg} = 0{,}0825\,ft$ (kern, fig 28) $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$

$$a_t = \frac{DI \times C' \times B}{144 P_T} = \frac{39 \times 0{,}00075}{144 \times 6} = 0{,}000033854\,ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{33000 lb/h}{0{,}000033854\,ft^2} = 974769231 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(974769231 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0825\,ft)}{0{,}386 \frac{lb}{h\ ft}} = 208337983$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 192.868$

$h_c = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =192.868 ; k= 0, 3323 BTU/h pie F; L= 20 ft

$h_c = 3.2045$

Hallamos ahora sí, los coeficientes globales de transferencia de calor:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f}$$

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{h_c}$$

U_T = 0.89195

U_c = 0.89045

Intercambiador de calor E-802

i. Tipo: Tubo y coraza
ii. Material: Acero inoxidable 430
iii. Dimensiones: 11 ft largo
2.33 ft Diámetro

		Propiedades	Entrada	Salida
Tubos	**Gas de proceso**	Flujo másico (lb/hr)	163608	163608
		Temperatura (°F)	533	385
		Presión (PSIG)	110	109
Coraza	**Aire**	Flujo másico (lb/hr)	140739	140739
		Temperatura (°F)	165	456
		Presión (PSIG)	106	107

iv. Área de transferencia: 1100 ft^2
v. CALCULOS

Para el cálculo del coeficiente global de transferencia de calor, U_T, tenemos la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

Donde $h_f = \frac{Nu\ k}{L}$, dx_i = espesor de *i*, *k* = conductividad térmica de *i*, *i*, representa el material del equipo.

Para hallar h_f:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,2675 BTU/ lb F; μ = 0,02313 lb/h ft ; n =0,3(turbulento)

k= 0,06692 BTU/h ft^2 F

$\mathrm{Pr} = 0{,}0924578$

D = 0,834 pulg = 0,0695 ft (tabla 10. Kern); μ = 0,02313 lb/h ft

$Re = \frac{G_T D}{\mu}$; $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$; $a_t = 0{,}546\, pu\,\mathrm{lg}^2(\text{kern, tabla } 10)$

$$a_t = \frac{0{,}546 \times 360}{0{,}95 \times 144} = 1{,}4368421\, ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{163608 lb/h}{1{,}4368421\, ft^2} = 113866{,}37 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(113866{,}37 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0695\, ft)}{0{,}02313 \frac{lb}{h\ ft}} = 342140{,}64$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 301{,}21362$

$h_f = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =301,21362; k= 0, 06692 BTU/h pie F; L= 11 ft

$h_f = 1{,}0078608$

Para hallar h_c:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,2517BTU/ lb F; μ = 0,04984 lb/h ft; k= 0,01697 BTU/h pie F ;

$n = 0.3$ (régimen turbulento)

$\mathrm{Pr} = 0{,}7392297$

$Re = \frac{G_T D_C}{\mu}$; $D_C = 0{,}99\,pu\,\text{lg} = 0{,}0825\,ft$ (kern, fig 28) $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$

$$a_t = \frac{DI \times C' \times B}{144 P_T} = \frac{32 \times 0{,}00075}{144 \times 6} = 0{,}000027778\,ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{140739 lb/h}{0{,}000027778\,ft^2} = 5066604000\,\frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\text{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(5066604000\,\frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0825\,ft)}{0{,}04984\,\frac{lb}{h\ ft}} = 8386734149$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 1824886{,}92$

$h_c = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =1824886,92; k= 0, 01697 BTU/h pie F; L= 11 ft

$h_c = 1548{,}4166$

Hallamos ahora sí, el coeficiente global de transferencia de calor:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

$U_T = 1.0072052$ BTU /h ft^2 F

Cooler Condenser E-801

i. Tipo: Tubo y coraza
ii. Material: Tubos: titanio

Coraza: Acero inoxidable

iii. Dimensiones: 42 ½" x 34´10 ¼" largo

		Propiedades	Entrada	Salida
Tubos	**Gas de proceso**	Flujo másico (lb/hr)	163608	163608
		Temperatura (°F)	385	116
		Presión (PSIG)	110	109

Coraza	**Agua**	Flujo másico (lb/hr)	600000	600000
		Temperatura (°F)	115	215
		Presión (PSIG)	106	107

iv. Área de transferencia: 7270 ft^2

v. CALCULOS

Para el cálculo del coeficiente global de transferencia de calor, U_T, tenemos la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

Donde $h_f = \frac{Nu\ k}{L}$, dx_i = espesor de *i*, *k* = conductividad térmica de *i*, *i*, representa el material del equipo.

Para hallar h_f:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,2904 BTU/ lb F; μ = 0,05585 lb/h ft ; n =0,3(turbulento)

k= 0,02118 BTU/h ft^2 F

Pr = 0,76576204

D = 0,834 pulg = 0,0695 ft (tabla 10. Kern); μ = 0,05585 lb/h ft

$Re = \frac{G_T D}{\mu}$; $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$; $a_t = 0{,}546\, pu\lg^2 (\text{kern, tabla } 10)$

$$a_t = \frac{0{,}546 \times 360}{1{,}12 \times 144} = 1{,}21875\, ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{163608 lb/h}{1{,}21875\, ft^2} = 134242{,}4615 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(134242{,}4615 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0695\, ft)}{0{,}05585 \frac{lb}{h\ ft}} = 1670519441$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 320{,}0642837$

$h_f = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =320,0642837; k= 0,02118 BTU/h pie F; L= 34 ft

$h_f = 0{,}338948076$

Para hallar h_c:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 1,031 BTU/ lb F; μ = 1,67 lb/h ft; k= 0,3627 BTU/h pie F ;

$n = 0.3$ (régimen turbulento)

$\mathrm{Pr} = 4{,}74709126$

$Re = \frac{G_T D_C}{\mu}$; $D_C = 0{,}99\,pu\,\mathrm{lg} = 0{,}0825\,ft$ (kern, fig 28) $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$

$$a_t = \frac{DI \times C' \times B}{144 P_T} = \frac{32 \times 0{,}00075}{144 \times 6} = 0{,}000027778\,ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{600000 lb/h}{0{,}000027778\,ft^2} = 21600000000 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(21600000000 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0825\,ft)}{1{,}67 \frac{lb}{h\ ft}} = 1067065868{,}26$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 612645{,}2817$

$h_c = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =612645,2817; k= 0, 01697 BTU/h pie F; L= 34 ft

$h_c = 11110{,}32218$

Hallamos ahora sí, el coeficiente global de transferencia de calor:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

U_T = 0,338937736 BTU /h ft^2

Torre de absorción

i. Tipo de Torre de absorción : Capucha con enfriamiento
ii. Material: Acero inoxidable 340L
iii. Dimensiones: 48 ft altura
11 ft Diámetro

ENTRADA		
	LB/H	LB-MOL/H
O_2	4771	149.1
N_2	117373	4189.9
NO	2920.99	97.37
NO_2	11909.01	258.89
N_2O_4	10310.20	112.07
HNO_3	149	2.4
H_2O	436	24.2
TOTAL	147869.202	4833.93
T(°F)	116	

VI. Cálculos

Para realizar los caculos para hallar la variación de la temperatura, descrita por la siguiente ecuación:

$$\Delta T = [(6.2x10^3\ X\ G_{NO}) + 2.845x10^4(G'_{N2O4} - G_{N2O4}]/G_{gas}C_{gas}$$

es necesario saber:

- G_{NO} = Flujo molar de NO en gas de alimentación (kmol/s)
- G'_{N2O4}= flujo molar de N_2O_4 después de la oxidación (kmol/s)
- G_{N2O4}= flujo molar de N_2O_4 antes de la oxidación (kmol/s)
- G_{gas} = Caudal molar de la mezcla total del gas (kmol/s)
- C_{gas}= promedio de C_p de la mezcla de gases (J/kmol K)

En la corriente de alimentación al plato numero 1, se tiene que:

G_{NO} = 0.0075361 kmol/s

G_{N2O4}=0.0177 kmol/s

Para calcular el flujo molar de N_2O_4 después de la oxidación, es necesario calcular

$$k_1 t P^2 = (b-a)^{-2}\left\{[X(b-a)/(1-X)b] - Ln\left[(1-X)/(1-\left(\frac{aX}{k1}\right))\right]\right\}$$

Donde:

- k_1= Constante de velocidad, obtenida de: $\log k_1 = \left[\left(\frac{635}{T}\right) - 1.0261\right]$; Para T= 113.2°F = 318.26 K
  $k_1 = e^{[(\frac{635}{T})-1.0261]} = e^{[(\frac{635}{31826})-1.0261]} = 2.63563713$
- t = tiempo de residencia en el espacio de oxidación (segundos)
  t=0.05 s
- P= presión de operación (bar)
  P=103 psig = 7.1 bar
- b = fracción molar inicial de O_2 en el gas
  b =0.074309882
- 2a = fracción molar inicial de NO en el gas;
  2a= 0.010069
- T = temperatura del gas (K) = 318.26 K
- X = fracción de NO oxidado adicionalmente = 0.9515

G'_{N2O4}= 0.001684096 Kmol/s

G_{gas} = 0.654242898 Kmol/s

$C_{gas} = \frac{d}{a}Cp_D + \frac{c}{a}Cp_C - \frac{b}{a}Cp_B - Cp_A$

$C_{gas} = -0.019151\ KJ/Kmol\ °K$

$$\Delta T = -259.21\ K = -6.9°F$$

Para calcular el flujo de acido nítrico formado en el plato 1:

$$F_a = \left[p_{NO} + p_{NOX} - \frac{k3E^3 + 2E^2}{k2 + E}\right](G_{NO} + G_{NOX})\, C(p_{NO} + p_{NOX})^{-1}$$

- p_{NO} = presión parcial de NO = 0.707918 psig
- p_{NOX} = presión parcial de NO_2 + N_2O_4= 10.493875 psig
- k_2 = Constante de equilibrio NO_2/N_2O_4 (Bodenstein)

$$k_2 = \frac{p^2{}_{NO2}}{p_{N2O4}} = 10^{(8.756-\frac{2838}{T})}\left[1-\left[(T/210.3)+\left(\frac{790}{T}\right)-(3.8794)\right]p_{NOX}\right]$$
$$= A[1 - Bp_{NOX}]$$
$$k_2 = \frac{p^2{}_{NO2}}{p_{N2O4}} = \frac{(5.406484)^2}{5.087391} = 5.745591255$$

- k_4 = constante de equilibrio NO/N_2O_4, hallada por:
$$\log k4 = 7.412 - 20.28921W + 32.47322W^2 - 30.87W^3$$
Donde, W= concentración de acido presente en el plato;

- $k_3 = k_4/k_2$
- E= Presión parcial de equilibrio de NO_2, determinada por:
$$3k_3E^3 + \left(\frac{2E^2}{k_2}\right) + E = 3p_{NO} + p_{NOX}$$
- C =Grado de aproximación al equilibrio (eficiencia del plato)
- F_a= moles de acido formado

F_a= 416.365 lbmol/h

De manera más sintetizada, los cálculos se realizan de la misma manera para los platos de las torres de NAN1. Al estar las dos torres de absorción en serie, se pueden contar los platos desde el número 1 hasta el plato 35. Se muestran los datos arrojados para los platos más significativos plato 1 y plato 35.

PLATO 1		
	LB/H	LB-MOL/H
O_2	13214.6997	412.96
N_2	135388.61	4835.31
NO	1790.59	59.69
NO_2	13675.04	297.28
N_2O_4	12867.94	139.87
HNO_3	149	2.4
H_2O	746.44	8.11
TOTAL	177832.33	5755.62
T(°F)	113.02	

Ácido saliente Plato 1			
	LB/HR	% Peso	LB-MOL/H
HNO_3	26230.99	53.6303921	416.364921
H_2O	21452.59	43.8607481	1191.81059
N_2O_4	1227.10	2.50885985	13.3380482
Total	48910.681	100	1621.51

PLATO 35		
	LB/H	LB-MOL/H
O_2	7439.45	232.48
N_2	135388.61	4835.31
NO	45.32	1.51
NO_2	114.09	2.48
N_2O_4	1.56	0.02
HNO_3	0.00	0.00
H_2O	969.81	53.88
TOTAL	143958.85	5125.68
T(°F)	97.99	

Para el plato 35, se tiene que:

Ácido saliente Plato 35			
	LB/H	%Peso	LB-MOL/H
HNO_3	21.40	0.1753451	0.340
H_2O	12183.18	99.8031665	676.843443
N_2O_4	2.62	0.02148837	0.02851229
Total	12207.21	100	677.212

NAN-3

Orden de los equipos de la planta:

- Compresor
- Turbina
- Filtro de aire
- Filtro de amoníaco

- Reactor
- Filtro de platino
- Intercambiador de calor
- Caldera de vapor residual
- Caldera de vapor residual
- Cooler Condenser (enfriador)
- Torre de Absorción

Filtro de aire NAN-3

ix. Tipo de filtro : De aire
x. Material Reactor y material filtrante: Acero carbón y lana de vidrio.
xi. Dimensiones: 13.12 ft altura y 4.725 ft diámetro.
xii. Cálculos:

Con los datos de entrada de flujo de entrada (F_{in}), la concentración (X), y la fracción de remoción (Xrr), se obtienen los flujos de salida y filtrado, reales, mediante las ecuaciones planteadas en los modelos, presentadas a continuación:

$$\mathrm{F}_{\mathrm{filtrado}} = X.(F_{in})$$

$$\mathrm{F}_{\mathrm{filtrado.real}} = F_{filtrado}(X_{rr}) = X(F_{in})(X_{rr})$$

$$F_{out.real} = F_{out} + (F_{filtrado} - F_{filtrado real})$$

F-in	115458
X	0.00561
F-out (100%)	114810.281
F-filtrado (100%)	647.71938
fracción removida (Xrr)	0.98
F-out real	114823.235
F-filtrado real	634.764992

Filtro de amoníaco NAN-3

i. Tipo de filtro : De amoníaco
ii. Material Reactor y material filtrante: Acero carbón e inoxidable 304 y lana de vidrio.
iii. Dimensiones: 13.12 ft altura y 4.725 ft diámetro.
iv. Cálculos:

Partiendo de los datos de entrada de flujo de entrada (F_{in}), la concentración (X), y la fracción de remoción (Xrr), se obtienen los flujos de salida y filtrado, reales, mediante las ecuaciones planteadas en los modelos:

F-in	7556
X	0.0045
F-out (100%)	7521.998
F-filtrado (100%)	34.002
fracción removida (Xrr)	0.99
F-out real	7522.33802
F-filtrado real	33.66198

Reactor

i. Tipo de Reactor : PBR
ii. Material Reactor y Gasa: Acero inoxidable 321 y Platino rodio (90:10)
iii. Dimensiones: 15 ft altura
5.25 ft Diámetro

	Propiedades	Agua	NH3	O2	N2
Entrada	Flujo másico (lb/hr)	1041	7381	25908	85326
	Temperatura (°F)	507	507	507	507
	Presión (PSIG)	115.5	115.5	115.5	115.5

	Propiedades	Agua	NO +NO2	O2	N2	N2O
Salida	Flujo másico (lb/hr)	12754	11965	9041	85660	239
	Temperatura (°F)	1190	1190	1190	1190	1190
	Presión (PSIG)	115	115	115	115	115

iv. Cálculos

Partiendo de la reacción de interés que ocurre a las condiciones dadas y del balance de moles para un reactor PBR tenemos:

$$4NH_3 + 5O_2 \rightarrow 4NO + 6H_2O$$

$$F_{A0}\frac{dX}{dW} = -r'_A$$

Para la velocidad de reacción tenemos:

$$r'_A = K[NH_3]^{0.36}[O_2]^{0.14}$$

Donde K es la constante de velocidad, dada por la ecuación de Arrhenius:

$$K = A \cdot e^{\frac{-Ea}{RT}}$$

Donde A es el denominado factor preexponencial y E es la energía de activación de la reacción, R es la constante de los gases y "T" es la temperatura en grados K.

Parámetros:

$$A = 3.5x10^{20}$$

$$E_a = 523754\,\text{J/mol}$$

$$R = 8.3143\,\text{J/K} \cdot \text{mol}$$

$$T = 1199.83K$$

Con estos valores calculamos la constante de velocidad K para luego obtener el valor de la velocidad reacción.

$$K = 5.52608\text{x}10^{-3}$$

Con este valor de K y las concentraciones de NH_3 y O_2 calculamos la velocidad de reacción:

$$r'_A = 1.9187\text{x}10^{-3}$$

Balance de energía:

El balance de energía, en el reactor esta dado por el balance de energía para un reactor no isotérmico empacado (PBR) en estado estacionario con cambiador de calor. El flujo de calor $\Delta\dot{Q}$, se da en términos del coeficiente total de transferencia de calor U; el área de intercambio de calor a y la diferencia entre la temperatura del refrigerante T_a y la temperatura del reactor, T.

Está dado por la siguiente expresión:

$$\frac{dT}{dW} = \frac{\frac{U_a}{\rho_a}(T_a - T) + r'_A \Delta H_{RX}(T)}{F_{ao}(\sum \Theta_i C_p + \Delta C_p X)} \qquad (29)$$

Donde U_a es el coeficiente global de calor, ρ_b es la densidad de bulto ΔH_{RX} es el calor de reacción, F_{ao} es el flujo molar inicial de amoniaco, θ_i es moles i/moles a, C_P es la capacidad calorífica y X es la conversión del reactor.

Donde el calor de reacción a la temperatura T, ΔHrx(T) se halla mediante la siguiente ecuación:

$$\Delta H_{Rx}(T) = \frac{d}{a}H_D(T) + \frac{c}{a}H_C(T) - \frac{b}{a}H_B(T) - H_A(T)$$

Para este caso los H y Cp para cada compuesto serían:

	Entalpía H (KJ/Kmol)	*Calor específico Cp (KJ/(lb.°f))*	$\Theta_{\theta i}$
NH_3	-798.1	0.896961	1
O_2	3.03x10^4	0.279997	1.25
NO	1.20x10^5	0.294767	1
H_2O	-2.06x10^5	0.6105285	1.25

Los demás términos constantes se hallan con las siguientes ecuaciones:

$\Delta Cp = \frac{d}{a}Cp_D + \frac{c}{a}Cp_C - \frac{b}{a}Cp_B - Cp_A$; $\Delta Cp = -0.029118\ KJ/lb\ °f$

$X = Conversion = 93.5\%$

$\rho_b = \frac{r_a}{r´_a}$; $\rho_b =$ 0.6445775 lb/ft^3

$r_a = Vel.de\ reaccion\ en\ funcion\ del\ volumen\ del\ reactor$

$r´_a = Vel.de\ reaccion\ en\ funcion\ de\ la\ masa\ del\ catalizador$

$\sum \theta_i c_p =$ 2.457517KJ/lb °f

$F_{ao} = 433.4\ lbmol/h$

$T_a = 350\ °F$

Para el cálculo del coeficiente global de transferencia de calor, U_T, tenemos la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

Donde $h_c = \frac{Nu\,k}{L}$, dx_i = espesor de *i*, *k* = conductividad térmica de *i*, *i*, representa el material del equipo.

Para hallar h_c:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,3038 BTU/ lb F; $\mu = 0{,}1284$ lb/h ft ; n =0,3(turbulento)

k= 0,0459 BTU/h ft² F

Pr = 0,849106

$Re = \frac{G_T D_C}{\mu}$; $D_C = 0.99\,pu\,\text{lg} = 0.0825\,ft$ (kern, fig 28) $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$

$$a_t = \frac{DI \times C' \times B}{144 P_T} = \frac{5.25 \times 0{,}75}{144 \times 3{,}75} = 0{,}0073 \text{ft}^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{119659 lb/h}{0{,}0073\,ft^2} = 16391643.84 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\text{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(16391643.84 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0825\,ft)}{0{,}1284 \frac{lb}{h\ ft}} = 11489469{,}98 \text{ (Régimen turbulento)}$$

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu =$ 9742.185

$h_c = \frac{Nu\,k}{L}$; Nu =9742.185 ; k= 0.0459 BTU/h pie F; L= 15 ft

$h_c =$ 29.8370652

Para hallar h_f:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,2515 BTU/ lb F; μ = 0,04585 lb/h ft; k= 0,01553 BTU/h pie F ;

$n = 0.3$ (régimen turbulento)

Pr = 0.7425161

$Re = \frac{G_T D}{\mu}$; $D = 0.99\,pu\,\text{lg} = 0.0825\,ft$ (kern, fig 28) $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$

$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$; $a_t = 0.836\,pu\,\text{lg}^2$ (kern, tabla 10)

$a_t = \frac{0.836 \times 950}{57.65 \times 144} = 0.06145833\,ft^2$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{101452 lb/h}{0.06145833\,ft^2} = 1650744{,}407 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\text{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(1650744{,}407 \frac{lb}{ft^2 h})(0.0825\,ft)}{0{,}04585 \frac{lb}{h\ ft}} = 2970259.838 \text{ (Régimen turbulento)}$$

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 3170.846019$

$h_f = \frac{Nu\,k}{L}$; Nu = 3170.846019; k= 0.0459 BTU/h pie F; L= 15 ft

h_f = 3.282882578

Hallamos ahora sí, el coeficiente global de transferencia de calor:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

U_T = 2.93828785 BTU /h ft^2 F

Teniendo los valores, se reemplazan en la ecuación de T:

$$T = -\left[\left[433.4(2.457517 + (-0.0272253))(0.0042875)(-226076.9)\right]\frac{0.6445775}{0.0645818} - 350\right]$$

$$T = 1188.159°F$$

Filtro de platino NAN-3

i. Tipo de filtro : De platino
ii. Material Reactor y material filtrante: Acero inoxidable 304 y fibra cerámica.
iii. Dimensiones: 13.12 ft altura y 4.725 ft diámetro.
iv. Cálculos:

Con los datos de entrada de Flujo de entrada (F_{in}), la concentración (X), y la fracción de remoción (Xrr), se obtienen los flujos de salida y filtrado, reales, mediante las ecuaciones planteadas en los modelos:

F-in	121450
X	0.0063
F-out (100%)	120684.865
F-filtrado (100%)	765.135
fracción removida (Xrr)	0.98
F-out real	120700.168
F-filtrado real	749.8323

Intercambiador de calor ME-0150

i. Tipo de Intercambiador : Tubo y coraza
ii. Material: Acero inoxidable 321
iii. Dimensiones: 10 ft altura
3.5 ft Diámetro
0.05108 ft Diámetro interno

		Propiedades	**Entrada**	**Salida**
Tubos	**Gas de proceso**	Flujo másico (lb/hr)	119659	119659
		Temperatura (°F)	1190	1033
		Presión (PSIG)	113	110
Coraza	**Aire**	Flujo másico (lb/hr)	101452	101452
		Temperatura (°F)	364	577

		Presión (PSIG)	123	120

iv. Área de transferencia: 538 ft^2

v. CALCULOS

Para el cálculo del coeficiente global de transferencia de calor, U_T, tenemos la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

Donde $h_f = \frac{Nu\,k}{L}$, dx_i = espesor de *i*, *k* = conductividad térmica de *i*, *i*, representa el material del equipo.

Para hallar h_f:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,3011 BTU/ lb F; μ = 0,09752 lb/h ft ; n =0,3(turbulento)

k= 0,03746 BTU/h ft^2 F

Pr = 0,7838567

D = 1,33 pulg = 0,110833 ft (tabla 10. Kern); μ = 0,09752 lb/h ft

$Re = \frac{G_T D}{\mu}$; $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$; $a_t = 0{,}546\,pu\,\mathrm{lg}^2$ (kern, tabla 10)

$$a_t = \frac{0{,}546 \times 137}{3{,}29347 \times 144} = 0{,}4144565\,ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{119659 lb/h}{0{,}4144565\,ft^2} = 288713{,}06 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(288713{,}06 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0695\,ft)}{0{,}09752 \frac{lb}{h\ ft}} = 205758.38 \text{ (Régimen turbulento)}$$

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

Nu = 380,78942

$h_f = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =380,78942; k= 0,03746 BTU/h pie F; L= 10 ft

$h_f =$ 0,7132186

Para hallar h_c:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 1,038 BTU/ lb F; μ = 0,9189 lb/h ft; k= 0,03844 BTU/h pie F ;

$n = 0.3$ (régimen turbulento)

Pr = 24,8131686

$Re = \frac{G_T D_C}{\mu}$; $D_C = 1{,}08\,pu\,\text{lg} = 0{,}09\,ft$ (kern, fig 28) $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$

$$a_t = \frac{DI \times C' \times B}{144 P_T} = \frac{32 \times 0{,}00075}{144 \times 6} = 0{,}000027778\,ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{101452 lb/h}{0{,}000027778\,ft^2} = 3652272000 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\text{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(3652272000 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0825\,ft)}{0{,}09189 \frac{lb}{h\ ft}} = 327905583 \text{ (Régimen turbulento)}$$

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu =$ 391499,807

$h_c = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =391499,807; k= 0, 03844 BTU/h pie F; L= 10 ft

$h_c = 752{,}46263$

Hallamos ahora sí, el coeficiente global de transferencia de calor:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

U_T = 0.7125432 BTU /h ft^2 F

Caldera de Vapor Residual ME-0163

i. Tipo: Tubo y coraza
ii. Material: Coraza: Acero al carbón
Tubos: acero inoxidable 430
iii. Dimensiones: 20 ft largo
3.42 ft Diámetro

		Propiedades	**Entrada**	**Salida**
Tubos	**Gas de proceso**	Flujo másico (lb/hr)	119659	119659
		Temperatura (°F)	1033	997
		Presión (PSIG)	111.5	110
Coraza	**Agua**	Flujo másico (lb/hr)	33000	33000
		Temperatura (°F)	383	742
		Presión (PSIG)	123	120

iv. Área de transferencia: 3370 ft^2

v. CALCULOS

Para el cálculo de los coeficientes globales de transferencia de calor, U_T y U_c, para tubos y coraza respectivamente, tenemos las siguientes ecuaciones:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f}$$

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{h_c}$$

Donde $h_f = \frac{Nu_f\, k}{L}$ y $h_c = \frac{Nu_c\, k}{L}$

Para hallar h_f:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,2966 BTU/ lb F; μ = 0,08827 lb/h ft ; n =0,3(turbulento)

k= 0,0345 BTU/h ft^2 F

$\mathrm{Pr} = 0{,}7588661$

D = 0,834 pulg = 0,0695 ft (tabla 10. Kern); μ = 0,08827 lb/h ft

$Re = \frac{G_T D}{\mu}$; $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$; $a_t = 0{,}546\, pu\,\mathrm{lg}^2$ (kern, tabla 10)

$a_t = \frac{0{,}546 \times 650}{3{,}587 \times 144} = 100.23415\, ft^2$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{119659 lb/h}{100.23415\, ft^2} = 1193.7947 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{\mathrm{G_T} D}{\mu} = \frac{(1193.7947 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0695\, ft)}{0.08827 \frac{lb}{h\ ft}} = 939.94261$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 5.0612578$

$h_f = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =5.0612578; k= 0, 0345 BTU/h pie F; L= 20 ft

$h_f = 0.0087307$

Para hallar h_c:

$$Nu_L = \frac{Ja^2}{C_{sf}}.\mathrm{Pr.m}$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0.4862 BTU/ lb F; μ = 0,3785 lb/h ft; k= 0,02 BTU/h pie F ;

$\mathrm{Pr} = 9.201335$

$Ja = \frac{C_p \Delta T}{h_{fg}}$; C_p= 0.4862 BTU/ lb F; ΔT= 821 °F, h_{fg}= 973.66 BTU/lb

C_{sf} = 0.0132

m = 2

$Re = \frac{G_T D_C}{\mu}$; $D_C = 0{,}99\, pu\,\mathrm{lg} = 0{,}0825\, ft$ (kern, fig 28) $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$

$a_t = \frac{DI \times C' \times B}{144 P_T} = \frac{39 \times 0{,}00075}{144 \times 6} = 0{,}000033854\, ft^2$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{33000 lb/h}{0{,}000033854\, ft^2} = 974769231 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(974769231 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0825\, ft)}{0{,}3785 \frac{lb}{h\ ft}} = 212466213$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 234.31$

$h_c = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =234.31 ; k= 0, 02 BTU/h pie F; L= 20 ft

$h_c = 0.234316$

Hallamos ahora sí, los coeficientes globales de transferencia de calor:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f}$$

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{h_c}$$

U_T =0.0087317

U_c = 0.014316

Caldera de vapor residual ME-0152

i. Tipo: Tubo y coraza
ii. Material: Coraza: Acero al carbón

Tubos: acero inoxidable 430

iii. Dimensiones: 20 ft largo
3.42 ft Diámetro

		Propiedades	**Entrada**	**Salida**
Tubos	**Gas de proceso**	Flujo másico (lb/hr)	119659	119659
		Temperatura (°F)	997	610
		Presión (PSIG)	110	109

Coraza	**Agua**	Flujo másico (lb/hr)	33000	33000
		Temperatura (°F)	383	742
		Presión (PSIG)	123	120

iv. Área de transferencia: 3370 ft^2

v. CALCULOS

Para el cálculo de los coeficientes globales de transferencia de calor, U_T y U_c, para tubos y coraza respectivamente, tenemos las siguientes ecuaciones:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f}$$

$$\frac{1}{U_c} = \frac{1}{h_c}$$

Donde $h_f = \frac{Nu_f\, k}{L}$ y $h_c = \frac{Nu_c\, k}{L}$

Para hallar h_f:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0,2956 BTU/ lb F; μ = 0,0866 lb/h ft ; n =0,3(turbulento)

k= 0,03381 BTU/h ft^2 F

Pr = 0,7571417

D = 0,834 pulg = 0,0695 ft (tabla 10. Kern); μ = 0,0866 lb/h ft

$Re = \frac{G_T D}{\mu}$; $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$; $a_t = 0{,}546\, pu\lg^2 (\text{kern, tabla } 10)$

$$a_t = \frac{0{,}546 \times 650}{3{,}587 \times 144} = 0{,}68707876\, ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{119659 lb/h}{0{,}68707876\, ft^2} = 174153{,}91 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(174153{,}91 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0695\, ft)}{0{,}0866 \frac{lb}{h\ ft}} = 139765{,}55$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 276{,}56747$

$h_f = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =276,56747; k= 0, 03381 BTU/h pie F; L= 20 ft

$h_f = 0{,}4675373$

Para hallar h_c:

$$Nu_L = \frac{Ja^2}{C_{sf}}.\mathrm{Pr.m}$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 1,157 BTU/ lb F; μ = 0,386 lb/h ft; k= 0,3323 BTU/h pie F ;

$\mathrm{Pr} = 1{,}3439723$

$Ja = \frac{C_p \Delta T}{h_{fg}}$; C_p= 1.157 BTU/ lb F; ΔT= 785 °F, h_{fg}= 973.66 BTU/lb

C_{sf} = 0.0132

m = 2

$Re = \frac{G_T D_C}{\mu}$; $D_C = 0{,}99\,pu\,\mathrm{lg} = 0{,}0825\,ft$ (kern, fig 28) $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$

$$a_t = \frac{DI \times C' \times B}{144 P_T} = \frac{39 \times 0{,}00075}{144 \times 6} = 0{,}000033854\,ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{33000 lb/h}{0{,}000033854\,ft^2} = 974769231 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(974769231 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0825\,ft)}{0{,}386 \frac{lb}{h\ ft}} = 208337983$$ (Régimen turbulento)

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 177.1869$

$h_c = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =177.1869; k= 0, 3323 BTU/h pie F; L= 20 ft

$h_c = 2.9439$

Hallamos ahora sí, los coeficientes globales de transferencia de calor:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} ; \frac{1}{U_c} = \frac{1}{h_c}$$

U_T = 0.4675373

U_c = 0.46439

Cooler Condenser E-1601

i. Tipo: Tubo y coraza
ii. Material: Acero inoxidable 430
iii. Dimensiones: : 42 ½" x 34´10 ¼" largo

		Propiedades	Entrada	Salida
Tubos	**Gas de proceso**	Flujo másico (lb/hr)	119659	119659
		Temperatura (°F)	610	115
		Presión (PSIG)	108	107
Coraza	**Agua**	Flujo másico (lb/hr)	600000	600000
		Temperatura (°F)	115	215
		Presión (PSIG)	106	106

iv. Área de transferencia: 7270 ft^2
v. CALCULOS

Para el cálculo del coeficiente global de transferencia de calor, U_T, tenemos la siguiente ecuación:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

Donde $h_f = \frac{Nu\ k}{L}$, dx_i = espesor de *i*, *k* = conductividad térmica de *i*, *i*, representa el material del equipo.

Para hallar h_f:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 0.2853 BTU/ lb F; $\mu = 0.06816$ lb/h ft ; n =0,3(turbulento)

k= 0.02601 BTU/h ft^2 F

Pr = 0,7476374

D = 0,834 pulg = 0,0695 ft (tabla 10. Kern); $\mu = 0{,}06816$ lb/h ft

$Re = \frac{G_T D}{\mu}$; $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$; $a_t = 0{,}546\, pu\,\mathrm{lg}^2 (\text{kern, tabla } 10)$

$$a_t = \frac{0{,}0695 \times 360}{0{,}92175 \times 144} = 1.48087\ ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{119659 lb/h}{1.48087\ ft^2} = 80802.7 \frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(80802.7 \frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0695\ ft)}{0.06816 \frac{lb}{h\ ft}} = 82391.25 \text{ (Régimen turbulento)}$$

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

Nu = 180.5261

$h_f = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =180.5261; k= 0, 02601 BTU/h pie F; L= 20 ft

h_f = 0.2347742

Para hallar h_c:

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^n$$

$Pr = \frac{C_p \mu}{k}$; C_p= 1.031 BTU/ lb F; $\mu = 1.408$ lb/h ft; k= 0.3691 BTU/h pie F ;

$n = 0.3$ (régimen turbulento)

Pr = 3.93293958

$Re = \frac{G_T D_C}{\mu}$; $D_C = 0{,}99\,pu\,\lg = 0{,}0825\,ft$ (kern, fig 28) $G_T = \frac{\dot{m}}{a_t}$

$$a_t = \frac{DI \times C' \times B}{144 P_T} = \frac{32 \times 0{,}00075}{144 \times 6} = 0{,}000027778\,ft^2$$

$$G_T = \frac{\dot{m}}{a_t} = \frac{600000 lb/h}{0{,}000027778\,ft^2} = 21600000000\,\frac{lb}{ft^2 h}$$

$$\mathrm{Re} = \frac{G_T D}{\mu} = \frac{(21600000000\,\frac{lb}{ft^2 h})(0{,}0825\,ft)}{1.408\,\frac{lb}{h\ ft}} = 1265625000.00 \text{ (Régimen turbulento)}$$

Teniendo todos los valores necesarios, hallamos el Nu:

$Nu = 663723.2856$

$h_c = \frac{Nu\ k}{L}$; Nu =663723.2856; k= 0.3691BTU/h pie F; L= 20 ft

$h_c = 12249.013$

Hallamos ahora sí, el coeficiente global de transferencia de calor:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_f} + \frac{dx_i}{k_i} + \frac{1}{h_c}$$

U_T = 0.2347697 BTU /h ft^2 F

Torre de absorción

i. Tipo de Torre de absorción : Capucha con enfriamiento
ii. Material: Acero inoxidable 340L
iii. Dimensiones: 48 ft altura – 24 ft altura
11 ft Diámetro

ENTRADA		
	LB/H	LB-MOL/H
O_2	2079.9	65
N_2	84770.2	3026.06

NO	1308.3	43.6
NO_2	5334	115.94
N_2O_4	4617.9	50.19
HNO_3	87	1.38
H_2O	215.3	11.95
TOTAL	98412.6	3314.12
T(°F)	112.7	

iv. Cálculos

Para realizar los caculos para hallar la variación de la temperatura, descrita por la siguiente ecuación:

$$\Delta T = [(6.2x10^3\ X\ G_{NO}) + 2.845x10^4(G'_{N2O4} - G_{N2O4}]/G_{gas}C_{gas}$$

es necesario saber:

- G_{NO} = Flujo molar de NO en gas de alimentación (kmol/s)
- G'_{N2O4}= flujo molar de N_2O_4 después de la oxidación (kmol/s)
- G_{N2O4}= flujo molar de N_2O_4 antes de la oxidación (kmol/s)
- G_{gas} = Caudal molar de la mezcla total del gas (kmol/s)
- C_{gas}= promedio de C_p de la mezcla de gases (J/kmol K)

En la corriente de alimentación al plato numero 1, se tiene que:

G_{NO} = 0.003375 kmol/s

G_{N2O4}=0.00790972 kmol/s

Para calcular el flujo molar de N_2O_4 después de la oxidación, es necesario calcular

$$k_1 t P^2 = (b-a)^{-2}\left\{[X(b-a)/(1-X)b] - Ln\left[(1-X)/(1-\left(\frac{aX}{k1}\right))\right]\right\}$$

Donde:

- k_1= Constante de velocidad, obtenida de: $\log k_1 = \left[\left(\frac{635}{T}\right) - 1.0261\right]$; Para T= 109.8°F = 316.37 K

  $k_1 = e^{[(\frac{635}{T})-1.0261]} = e^{[(\frac{635}{31637})-1.0261]} = 2.730633229$
- t = tiempo de residencia en el espacio de oxidación (segundos)
  t=0.05 s
- P= presión de operación (bar)

P=100 psig = 6.89 bar

- b = fracción molar inicial de O2 en el gas
  b =0.049369861
- 2a = fracción molar inicial de NO en el gas;
  2a= 0.006872994
- T = temperatura del gas (K) = 316.37 K
- X = fracción de NO oxidado adicionalmente = 0.2029206

G'_{N2O4}= 0.0016050450 Kmol/s

G_{gas} = 0.45597823 Kmol/s

$C_{gas}= \frac{d}{a}Cp_D + \frac{c}{a}Cp_C - \frac{b}{a}Cp_B - Cp_A$

$C_{gas}= -0.019151\ KJ/Kmol\ °K$

$$\Delta T = -258.21\ K = -5.1°F$$

Para calcular el flujo de acido nítrico formado en el plato 1:

$$F_a = \left[p_{NO} + p_{NOX} - \frac{k3E^3 + 2E^2}{k2 + E}\right]\left(G_{NO} + G_{NOX}\right) C\left(p_{NO} + p_{NOX}\right)^{-1}$$

- p_{NO} = presión parcial de NO = 0.707918 psig
- p_{NOX} = presión parcial de NO_2 + N_2O_4= 10.493875 psig
- k_2 = Constante de equilibrio NO_2/N_2O_4 (Bodenstein)

$$k_2 = \frac{p^2{}_{NO2}}{p_{N2O4}} = 10^{\left(8.756 - \frac{2838}{T}\right)}\left[1 - \left[(T/210.3) + \left(\frac{790}{T}\right) - (3.8794)\right]p_{NOX}\right]$$

$$= A[1 - Bp_{NOX}]$$

$$k_2 = \frac{p^2{}_{NO2}}{p_{N2O4}} = \frac{(5.406484)^2}{5.087391} = 5.745591255$$

- k_4 = constante de equilibrio NO/N_2O_4, hallada por:

$$\log k4 = 7.412 - 20.28921W + 32.47322W^2 - 30.87W^3$$

  Donde, W= concentración de acido presente en el plato;

- $k_3 = k_4/k_2$
- E= Presión parcial de equilibrio de NO_2, determinada por:

$$3k_3E^3 + \left(\frac{2E^2}{k_2}\right) + E = 3p_{NO} + p_{NOX}$$

- C =Grado de aproximación al equilibrio (eficiencia del plato)
- F_a= moles de acido formado

F_a= 396.75 lbmol/h

De manera más sintetizada, los cálculos se realizan de la misma manera para los platos de las torres de NAN1. Al estar las dos torres de absorción en serie, se pueden contar los platos desde el número 1 hasta el plato 49. (torre 1= 35 platos y torre 2=14 platos). Se muestran los datos arrojados para los platos mas significativos plato 1 y plato 49.

PLATO 1		
	LB/H	LB-MOL/H
O2	5760.9	180.03
N2	97781.6	3490.53
NO	802	26.73
NO2	6125	133.14
N2O4	5763.5	62.64
HNO3	87	1.38
H2O	368.6	20.46
TOTAL	116688.6	3914.91
T(°F)	109.8	

Ácido saliente Plato 1			
	LB/HR	% Peso	LB-MOL/H
HNO3	24999.7	53.6304	396.74
H2O	20445.6	43.8607	1134.9
N2O4	1169.5	2.5089	12.71
Total	46614.8	100	1544.35

Para el plato 49, se tiene que:

PLATO 49		
	LB/H	LB-MOL/H
O2	3243.2	101.35
N2	97781.6	3490.53
NO	20.3	0.68
NO2	51.1	1.11
N2O4	0.7	0.01
HNO3	0	0
H2O	478.9	26.58

TOTAL	101575.8	3620.26
T(°F)	95.2	

Ácido saliente Plato 49			
	LB/H	%Peso	LB-MOL/H
HNO3	20.4	0.1757	0.32
H2O	11611.3	99.8025	644.53
N2O4	2.5	0.0218	0.03
Total	11634.2	100	644.88

ANEXO F. MANUAL DEL USURARIO "SOFTWARE HNO3.UDC-*A* SIMULATOR V1.0

HNO3.UdC-A

Simulator V1.0

UNIVERSIDAD DE CARTAGENA

MANUAL DE USO DEL SOFTWARE PARA LA EVALUACIÓN Y SIMULACIÓN DE LAS PLANTAS DE ÁCIDO NÍTRICO DE ABOCOL S.A, (EN PLATAFORMA-MICROSOFT VISUAL BASIC® 6.0)

Contenido

1. Introducción.
2. Descripción del software.
3. ¿Cómo usar el software?

3.1 Descripción pantalla de inicio.
3.2 Descripción pantalla de Reactor (Convertidor).
3.3 Descripción pantalla de Intercambiadores de calor.
3.4 Descripción pantalla de Caldera.
3.5 Descripción pantalla de Enfriadores (Coolers).
3.6 Descripción pantalla de Torres de absorción.
3.7 Descripción pantalla de Equipos complementarios (Turbinas, compresores filtros)

1. INTRODUCCIÓN

Este manual está dirigido para explicar el funcionamiento del **Software HNO3.UdC-*A* Simulator V1.0**, que permite la evaluación y simulación de las tres plantas de ácido nítrico (NAN-1, NAN-2, NAN-3) que se encuentran en ABOCOL S.A, usando la plataforma de VISUAL BASIC®.

Esta herramienta interactiva favorece la evaluación de las condiciones de las plantas de producción, de manera eficiente y eficaz. Asimismo, conlleva a un manejo adecuado de la información del proceso, lo que permite una fácil comprensión y e interpretación de las condiciones de producción.

2. DESCRIPCIÓN DEL SOFTWARE

El **Software HNO3.UdC-*A* Simulator V1.0**, es una herramienta computacional desarrollada en la Facultad de Ingeniería, Programa de Ingeniería Química de la Universidad de Cartagena, bajo la plataforma Visual Basic®. El software permite la evaluación y simulación de las plantas de producción de ácido nítrico en Abocol S.A. Éste permite predecir las condiciones de operación de manera práctica y eficaz.

Los ejecutables de las tres plantas obedecen a un proceso generalizado, el cual comienza desde el convertidor (Reactor), pasando por calderas de vapor residual, intercambiadores de calor, enfriadores, para culminar en las torres de absorción, donde se produce el ácido nítrico.

El siguiente manual explica paso a paso lo que va ocurriendo con las temperaturas y los flujos en cada equipo, siguiendo la secuencia anteriormente planteada. La siguiente figura muestra el diagrama de procesos de flujo. Esta figura servirá de guía para seguir el algoritmo propuesto por el software, la cual podrá ser vista en el ejecutable del programa.

El software fue validado con datos experimentales suministrados por Abocol S.A., a partir de sus tres plantas de producción.

Diagrama de flujo del proceso

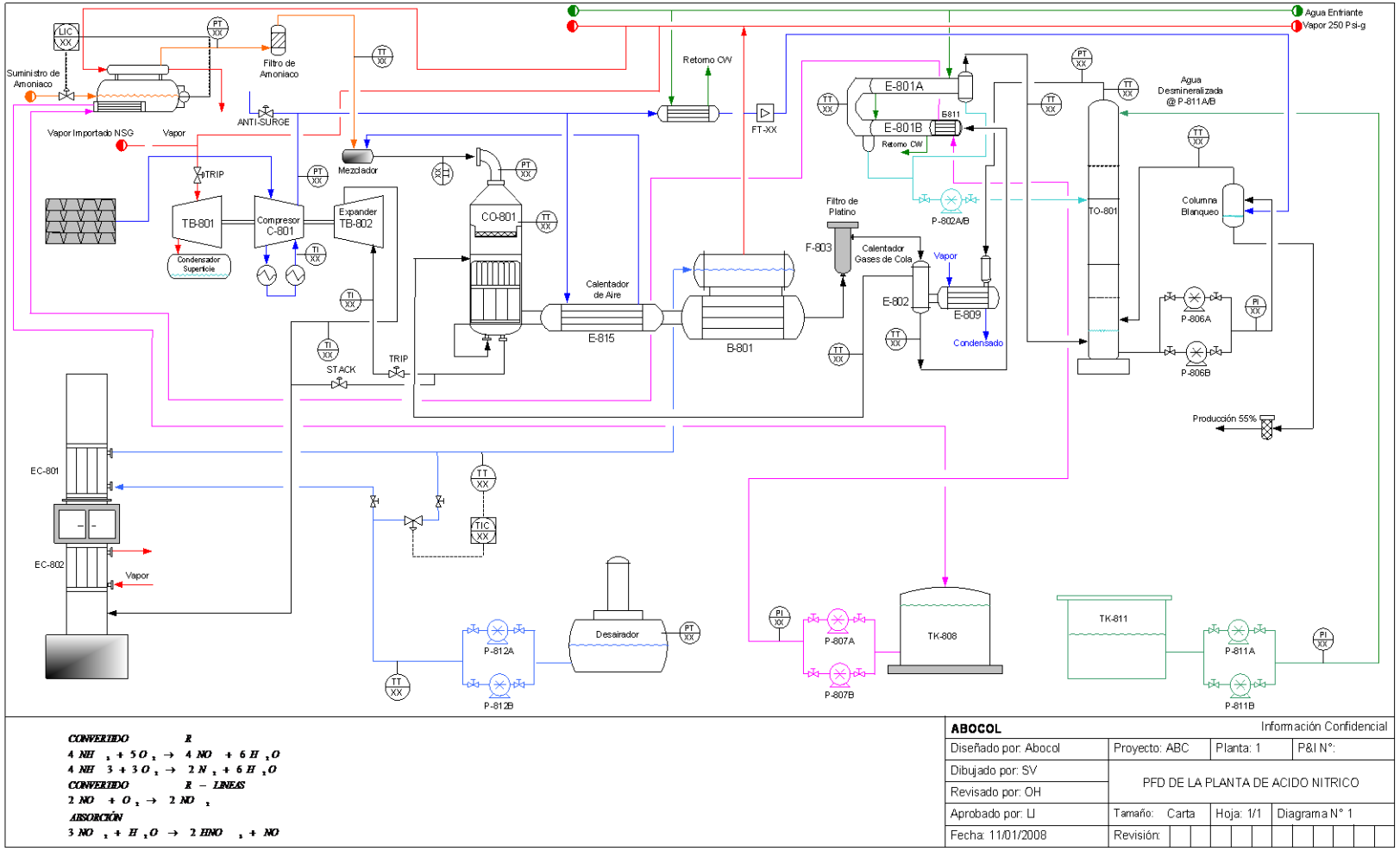
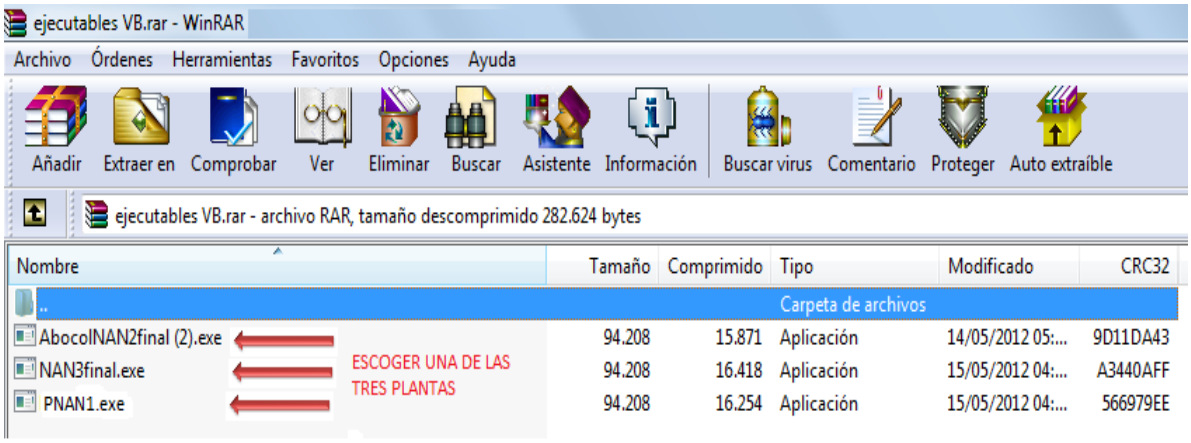


Figura 1. Diagrama de Flujo de la planta de ácido nítrico. Planta Norte. ABOCOL S.A

3. ¿CÓMO USAR EL SOFWARE?

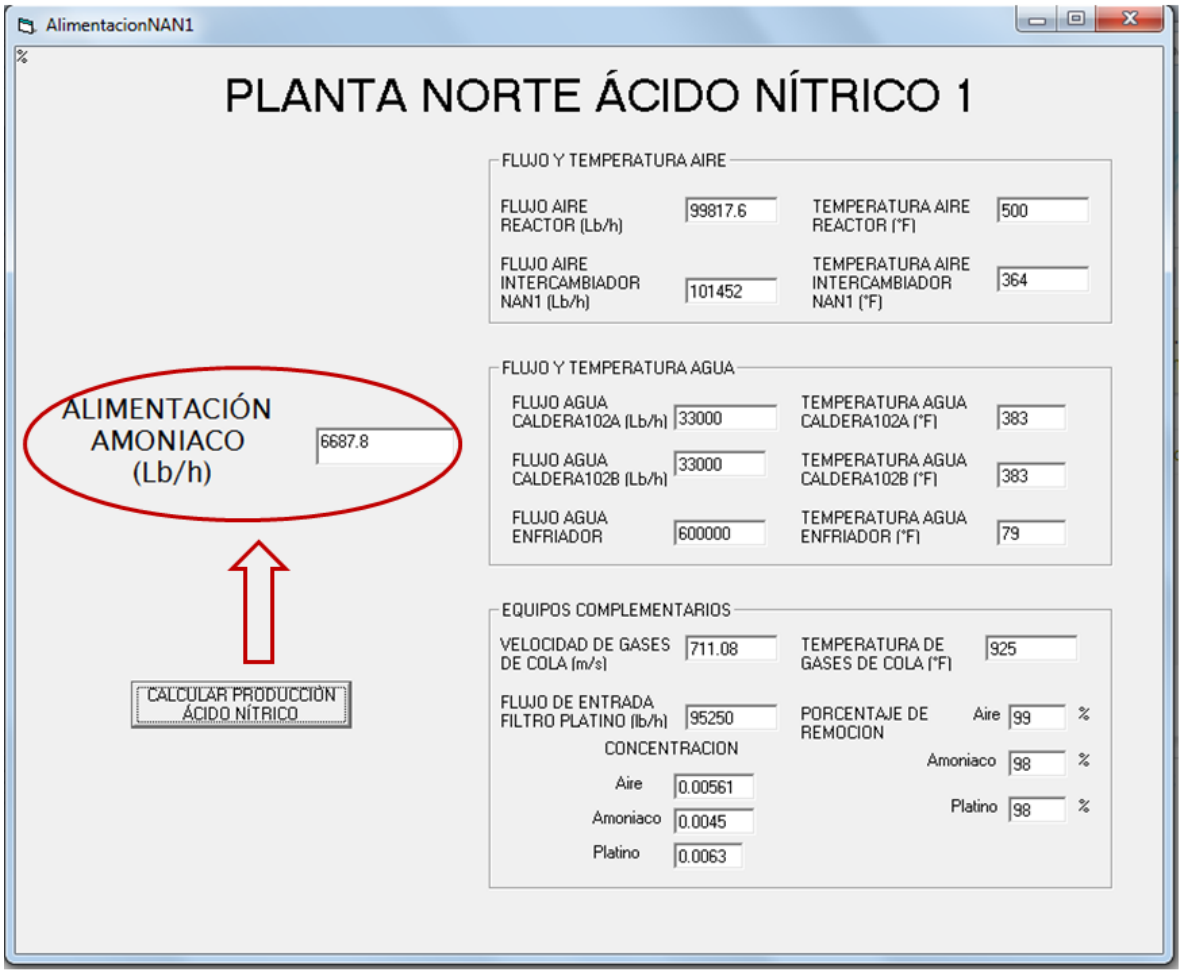
Éste software es de fácil utilización y para su ejecución no es necesario que el usuario instale Visual Basic® en el ordenador. Éste ejecutable realizará la reproducción deseada. Se debe empezar por escoger una de las tres plantas de producción de ácido nítrico. Los comportamientos en las tres plantas son similares, ya que los modelos matemáticos utilizados son generales, pero con las especificaciones para cada equipo. Lo que varía sustancialmente es la producción ya que en la realidad, las tres plantas no producen la misma cantidad de producto.



Para comenzar a ejecutar el programa, escoja una de las tres plantas pulsando doble click en la requerida.

3.1 DESCRIPCIÓN PANTALLA DE INICIO

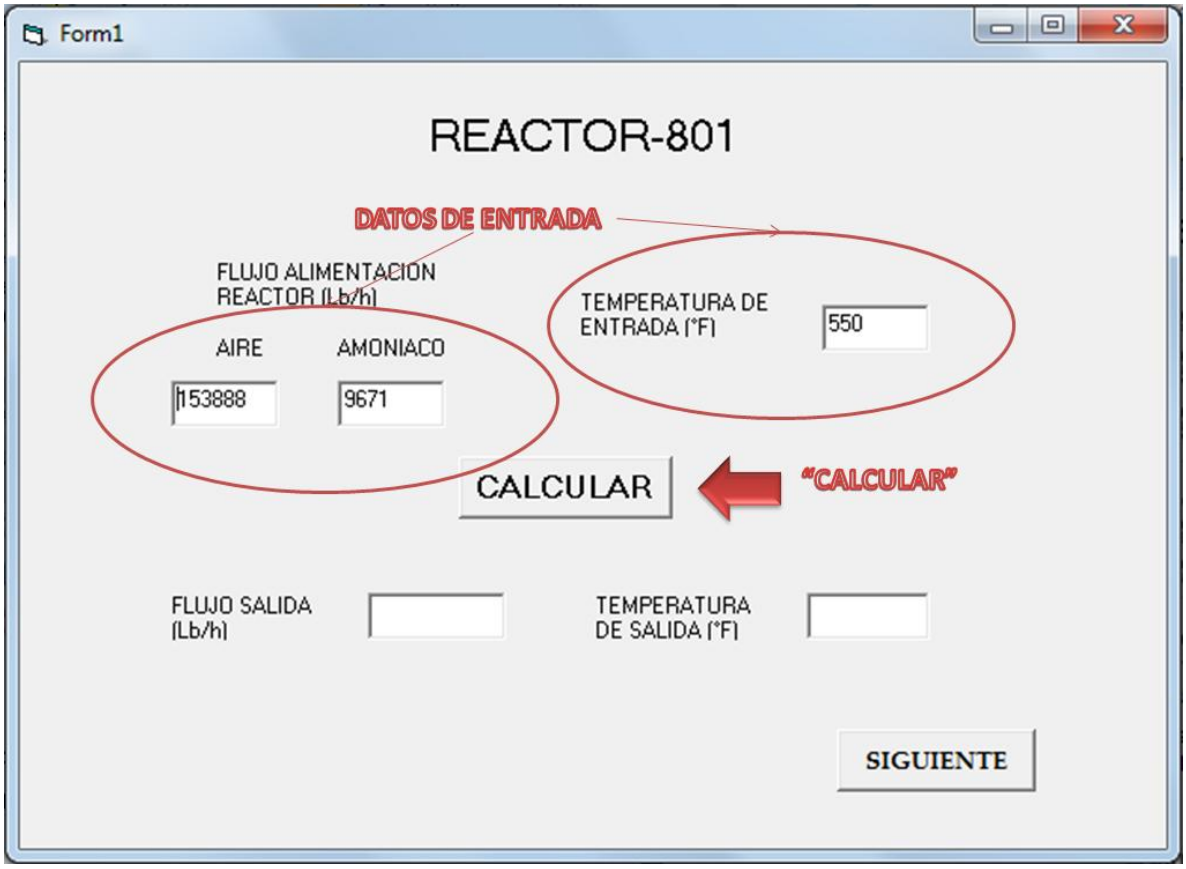
Al entrar a una de las plantas, se despliega una pantalla similar a la mostrada a continuación. La primera parte contiene las casillas donde se debe insertar los datos necesarios para que el programa realice la simulación de manera satisfactoria. El software permite modificar los datos de alimentación en la ejecución de la simulación, lo cual garantiza que es posible realizar un análisis de sensibilidad a diferentes condiciones de operación. El dato resaltado, de flujo de entrada de amoniaco, es la alimentación de la planta, por tanto es importante introducirlo adecuadamente en esta pantalla de inicio. Por defecto el programa asumiría que el dato de entrada es cero libras por hora si no se especifica un valor.



Luego de introducir los datos en las casillas mostradas en la figura anterior, se pulsa el botón “CALCULAR PROCUCCIÓN ÁCIDO NÍTRICO”

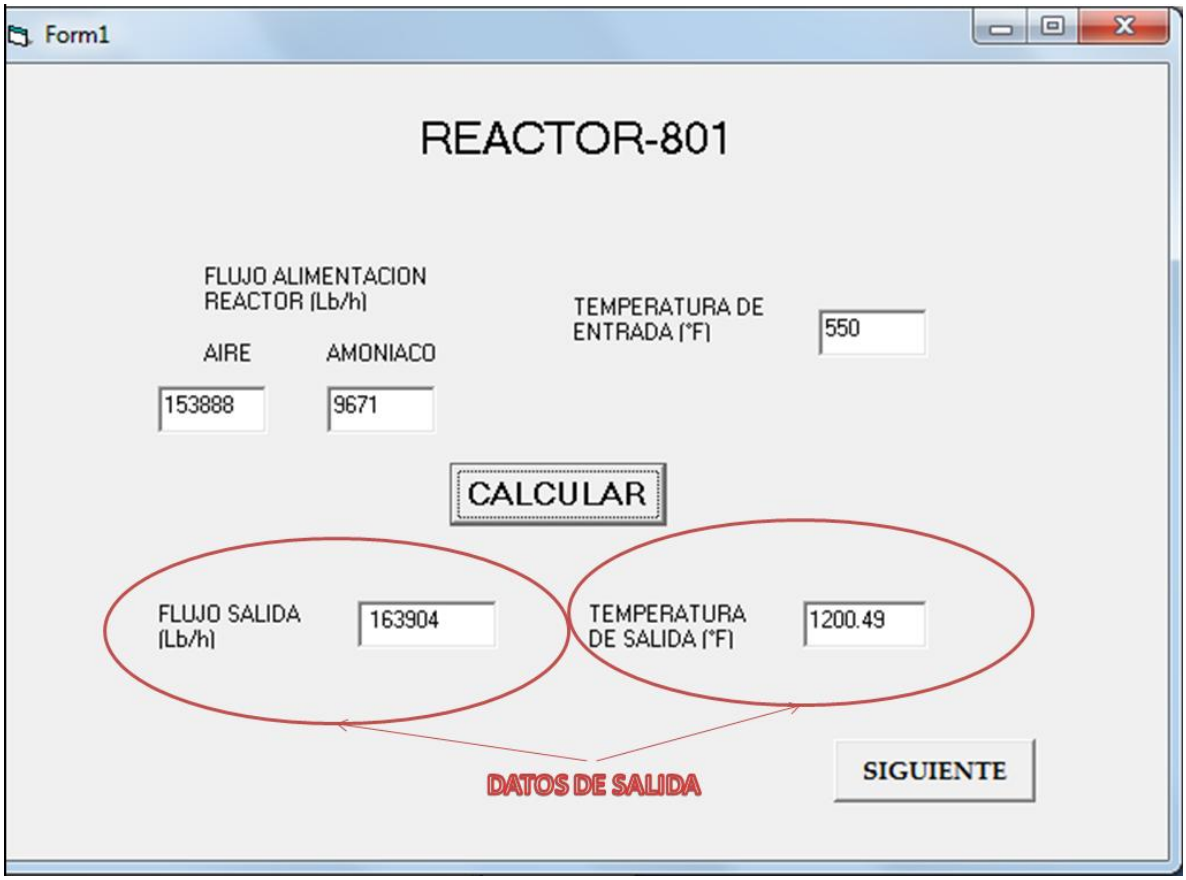
3.2 DESCRIPCIÓN PANTALLA DE REACTOR (CONVERTIDOR)

Al entrar en la ventana del “reactor”, se observan tres datos que el programa arrastra por defecto, correspondientes a los introducidos en la pantalla de inicio. Estos datos pueden ser modificados por el usuario antes de calcular la temperatura y los flujos de salida. Después de tener los datos de entrada para el reactor, pulse click en el botón “CALCULAR”, e inmediatamente aparece los valores de la temperatura de salida en grados Farenheit (°F) y el flujo de salida de gas de proceso (N2, O2, NO, NO2, N2O, H2O) en libras por hora (lb/h).



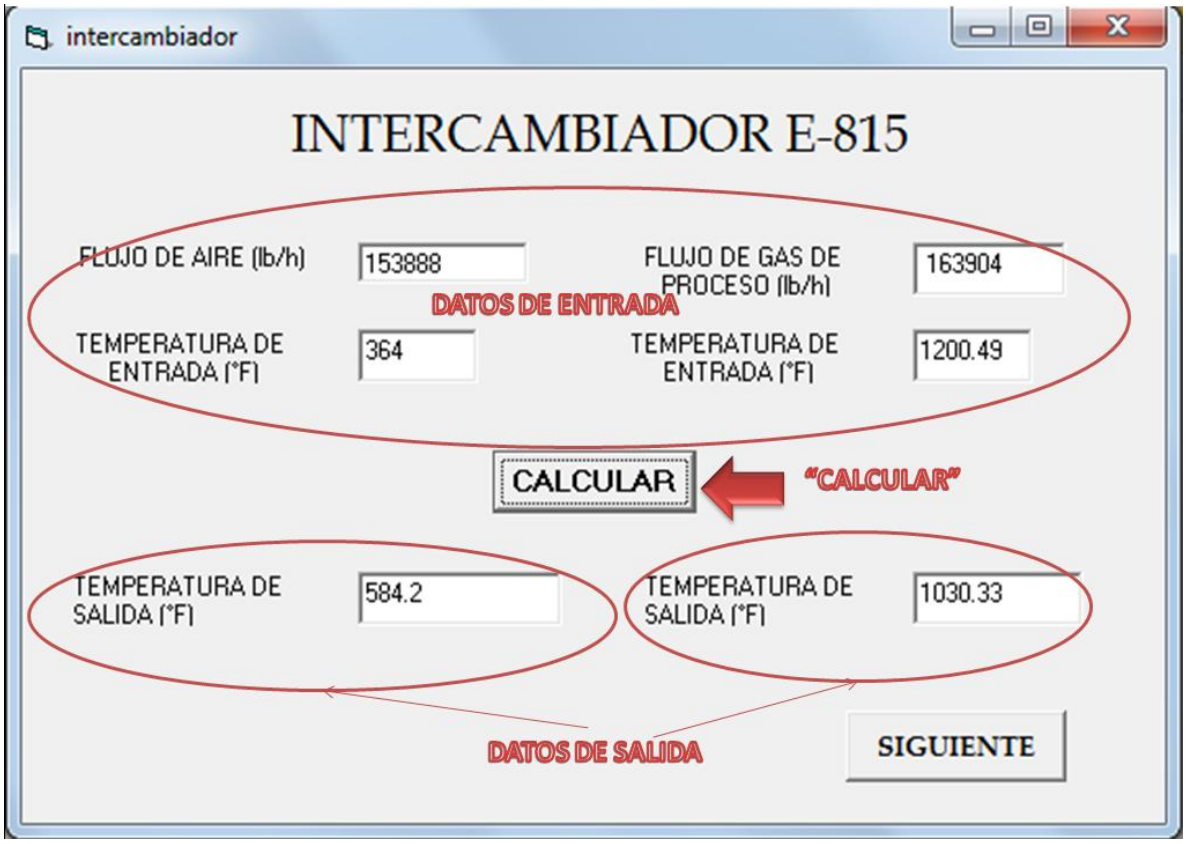
Los datos reportados son importados internamente por el software como datos de inicio para el próximo equipo, que en las tres plantas es un intercambiador de calor. Estos datos aparecerán automáticamente en el siguiente ambiente del software, además de datos de los datos de producción ingresados en la pantalla de inicio. Los datos pueden ser modificados manualmente con el fin de realizar análisis de sensibilidad de la planta evaluada.

A continuación pulse “SIGUIENTE” para continuar con la simulación.



3.3 DESCRIPCIÓN PANTALLA DE INTERCAMBIADORES DE CALOR.

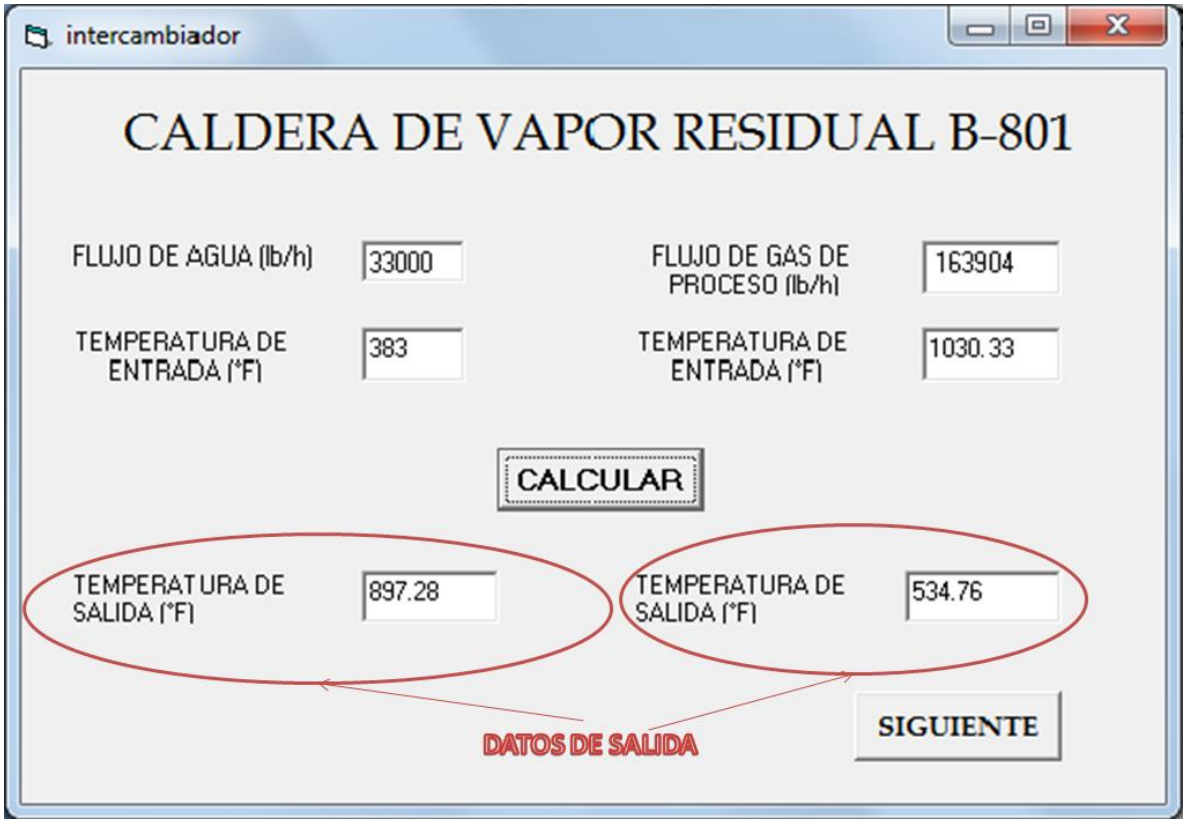
En la pantalla de intercambiadores, se requiere insertar datos tanto para la coraza como para los tubos (Temperaturas y flujos). Los datos del “lado tubos”, son por defecto los del gas de proceso, provenientes de la salida del reactor. El procedimiento para el cálculo es similar en todos los equipos, por tanto para el cálculo solo es necesario pulsar “click” en el botón “CALCULAR”. El procedimiento de los intercambiadores de calor arrojan las “TEMPERATURAS DE SALIDA” de los flujos de carcaza y tubos. La temperatura del “lado tubos” es importada por defecto para el equipo aguas abajo de cada intercambiador. El ambiente de intercambiadores se muestra a continuación:



A continuación pulse “SIGUIENTE” para continuar con la simulación.

3.4 DESCRIPCIÓN PANTALLA DE CALDERAS.

Luego de dar en el botón “SIGUIENTE”, se entra al ambiente de calderas. Similar a los equipos anteriores, aparecen los datos introducidos inicialmente para el flujo de aire a la caldera y los de gas de proceso, provenientes del equipo anterior, que en el caso de las tres plantas es un intercambiador. Los datos arrojados son de temperaturas de salida del vapor generado y del gas de proceso. Las calderas tienen un parecido a los intercambiadores de calor, en lo que se refiere al balance de materia, la diferencia radica en el cambio de fase que ocurre en la coraza (ebullición del agua). La parte de cálculo es similar a los ambientes anteriores, por tanto para realizar la simulación es necesario solo hacer “click” al botón “CALCULAR” y este arrojará los datos anteriormente mencionados. A continuación se muestra el ambiente en las calderas.

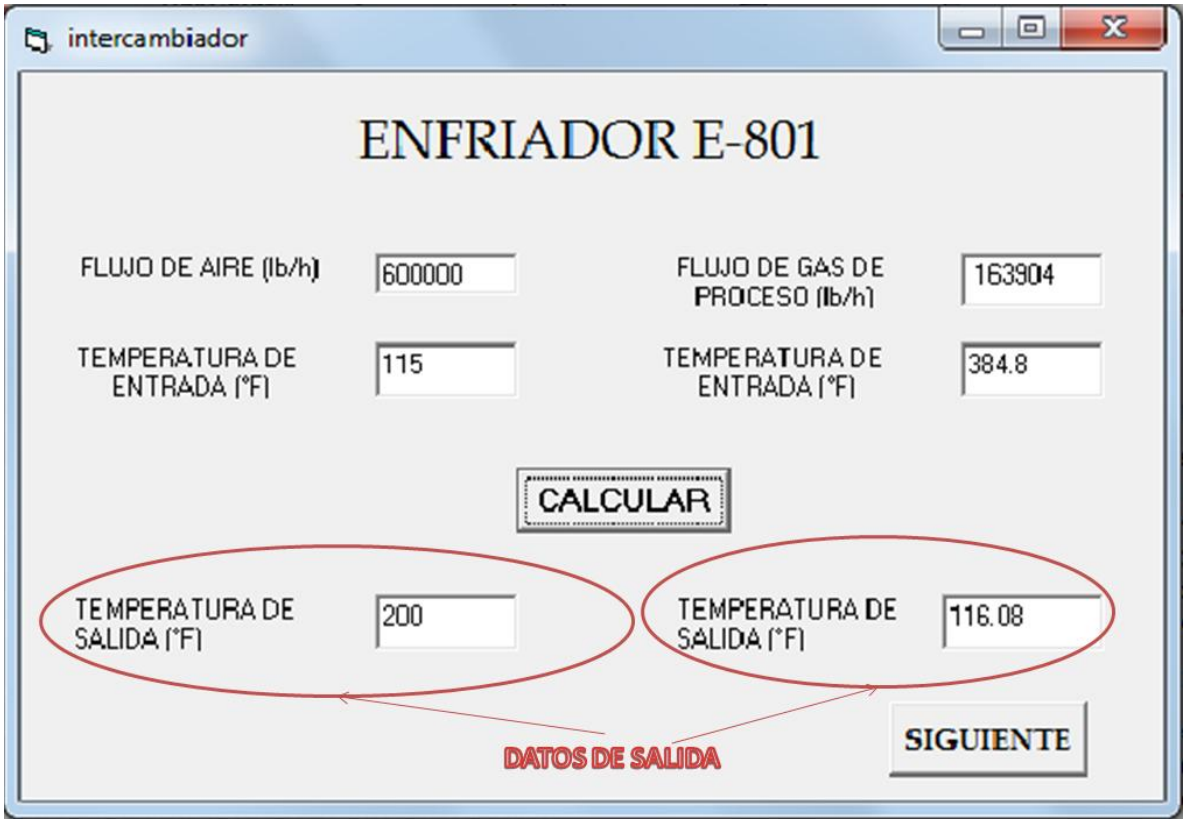


A continuación pulsar en el botón “SIGUIENTE” para continuar la simulación.

ACLARACIÓN: El paso al siguiente equipo depende de la planta evaluada. Para NAN2 continua hacia una caldera y luego pasa a otro intercambiador. Para NAN1 pasa a dos calderas que se simulan idénticamente puesto que se encuentran en paralelo. Para NAN3 pasa a dos calderas acopladas en serie, las cuales se simulan similarmente. En cada planta al darle al botón “SIGUIENTE”, muestra el equipo consecutivo respectivo.

3.5 DESCRIPCIÓN PANTALLA DE ENFRIADORES (COOLERS).

Los enfriadores tienen un comportamiento similar al de los intercambiadores de calor. Los flujos de entrada y salida son iguales, tanto en tubos como en coraza. El cálculo es similar al de los ambientes anteriores, introduciendo los datos faltantes (los de gas de proceso aparecen por defecto, provenientes del equipo simulado aguas arriba), luego dar calcular, arrojando las temperaturas de salida del aire y del gas de proceso. A continuación se muestra el ambiente de los enfriadores:



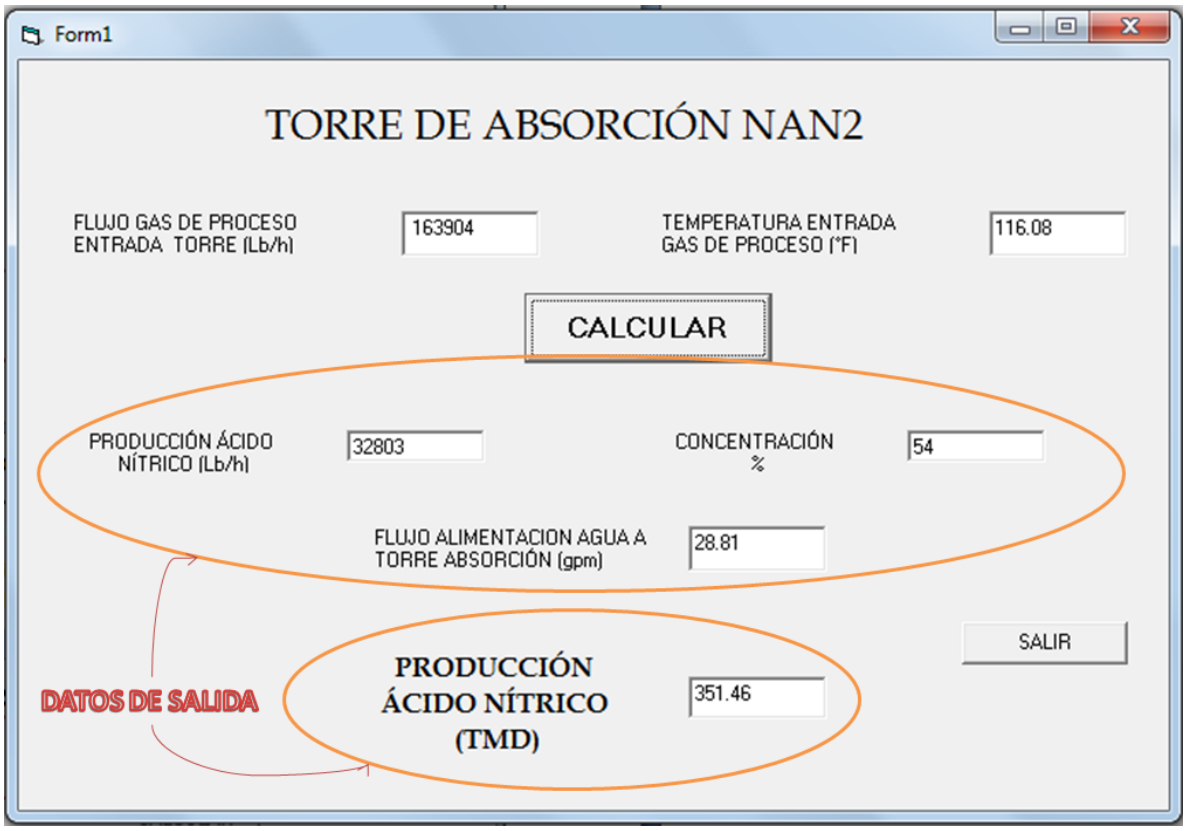
3.6 DESCRIPCIÓN PANTALLA DE TORRES DE ABSORCIÓN.

Luego de dar “SIGUIENTE” en el equipo aguas arriba a las torres de absorción, se encuentra el ambiente de “Las torres de absorción”.

Los datos de entrada son el flujo y la temperatura del gas de proceso.

Los datos de salida son la concentración máxima deseada según la entrada de gas de proceso; la entrada de agua necesaria para que se dé la reacción y se

mantenga la máxima concentración; y las producciones de ácido nítrico en Lb/h (libras por hora) o en TMD (toneladas métricas por día).

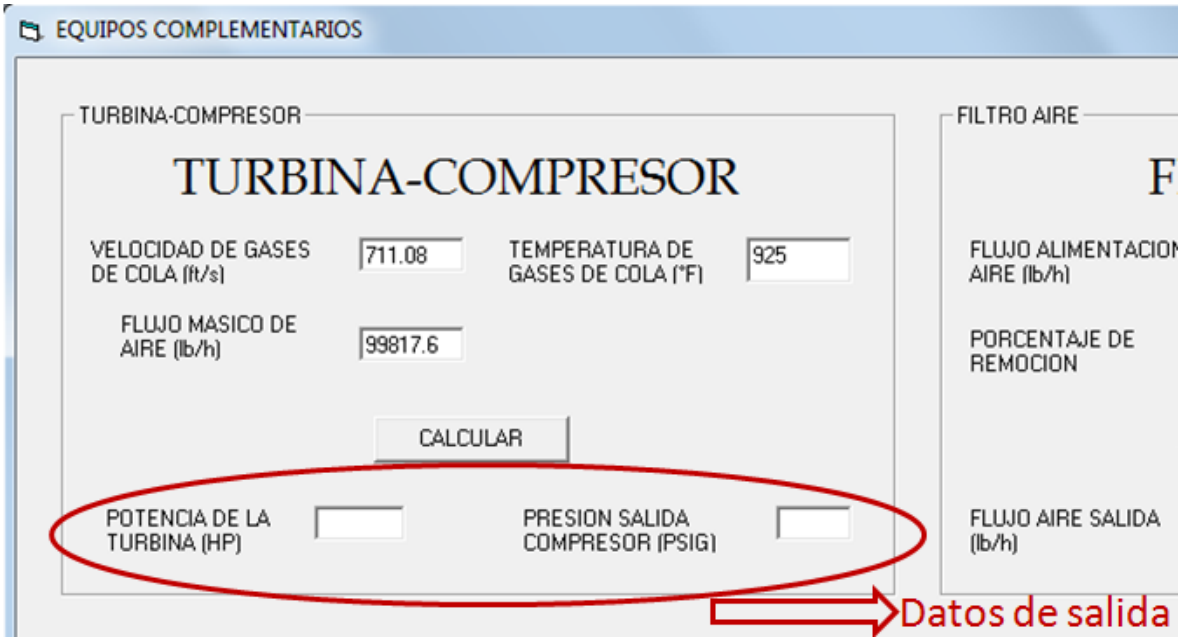


De esta forma se obtiene la producción de ácido dependiendo de la cantidad de amoniaco de entrada, y de las temperaturas que se manejan en cada uno de los equipos.

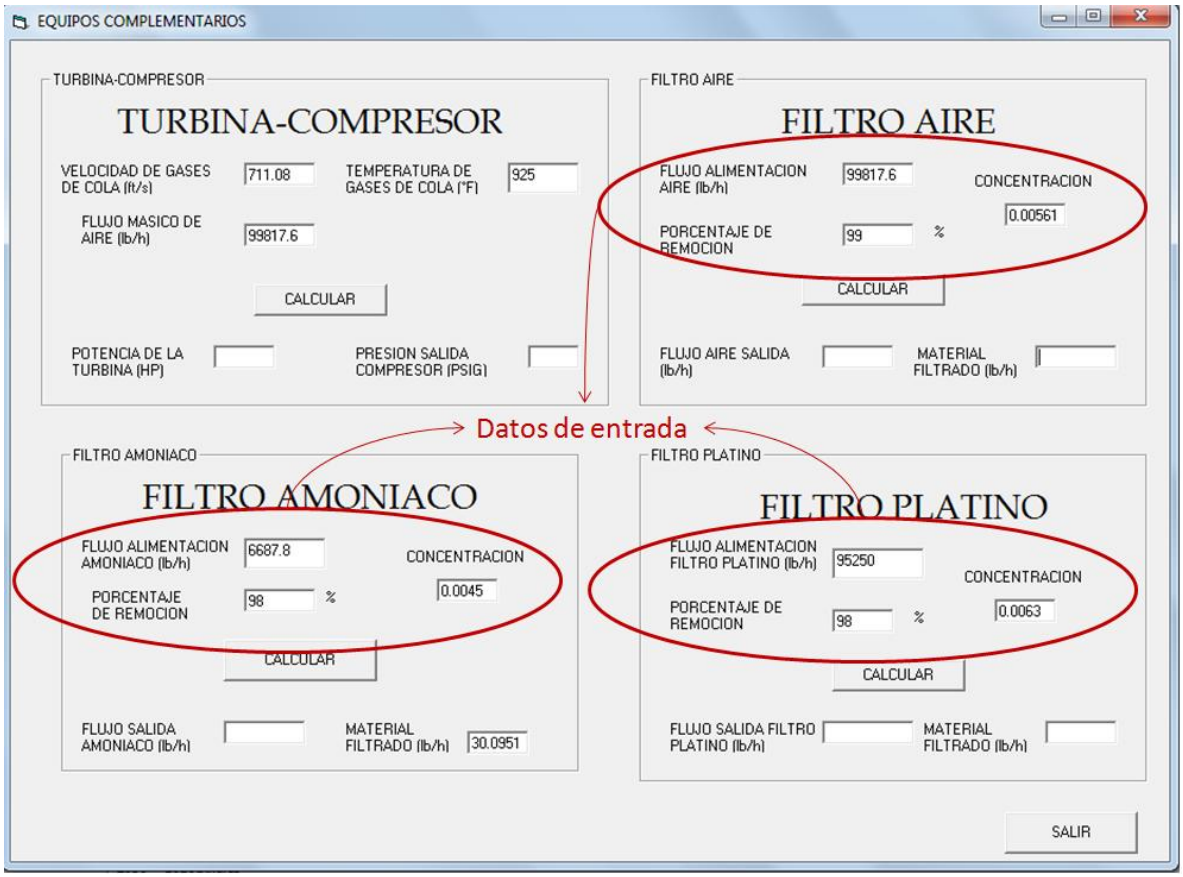
3.7 Descripción pantalla de Equipos complementarios (Turbinas, compresores y filtros).

En esta pantalla se muestran cuatro equipos, el compresor y la turbina (expander) como unos solo, ya que el trabajo realizado por el compresor es el aprovechado por la turbina para impulsar el aire. Los datos introducidos en esta pantalla (superior izquierda) son la velocidad de los gases de cola, el flujo másico de aire y la temperatura de entrada de los gases de cola, para de esta manera arrojar la potencia y presión generadas por el compresor y asu vez aprovechada por la turbina. Para esto se debe pulsar el boton “CALCULAR” como en los equipos anteriores.

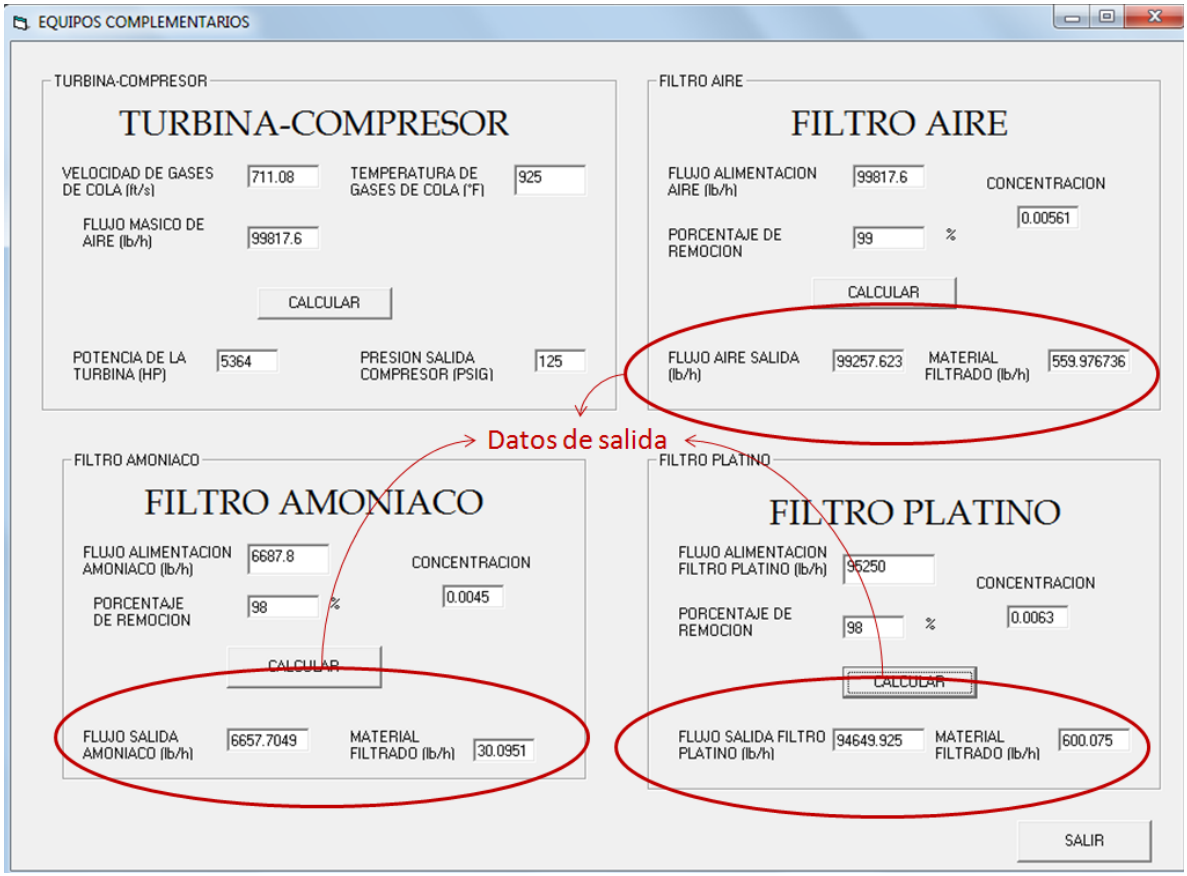
EQUIPOS COMPLEMENTARIOS
TURBINA-COMPRESOR
TURBINA-COMPRESOR
VELOCIDAD DE GASES DE COLA (ft/s)
711.08
TEMPERATURA DE GASES DE COLA (°F)
925
FLUJO MASICO DE AIRE (lb/h)
99817.6
CALCULAR
POTENCIA DE LA TURBINA (HP)
PRESION SALIDA COMPRESOR (PSIG)
FILTRO AIRE
FILTRO AIRE
FLUJO ALIMENTACION AIRE (lb/h)
99817.6
CONCENTRACION
0.00561
PORCENTAJE DE REMOCION
99
%
CALCULAR
FLUJO AIRE SALIDA (lb/h)
MATERIAL FILTRADO (lb/h)
Datos de entrada
FILTRO AMONIACO
FILTRO AMONIACO
FLUJO ALIMENTACION AMONIACO (lb/h)
6687.8
CONCENTRACION
0.0045
PORCENTAJE DE REMOCION
98
%
CALCULAR
FLUJO SALIDA AMONIACO (lb/h)
MATERIAL FILTRADO (lb/h)
30.0951
FILTRO PLATINO
FILTRO PLATINO
FLUJO ALIMENTACION FILTRO PLATINO (lb/h)
95250
CONCENTRACION
0.0063
PORCENTAJE DE REMOCION
98
%
CALCULAR
FLUJO SALIDA FILTRO PLATINO (lb/h)
MATERIAL FILTRADO (lb/h)
SALIR


EQUIPOS COMPLEMENTARIOS
TURBINA-COMPRESOR
TURBINA-COMPRESOR
VELOCIDAD DE GASES DE COLA (ft/s)
711.08
TEMPERATURA DE GASES DE COLA (°F)
925
FLUJO MASICO DE AIRE (lb/h)
99817.6
CALCULAR
POTENCIA DE LA TURBINA (HP)
PRESION SALIDA COMPRESOR (PSIG)
FILTRO AIRE
FLUJO ALIMENTACION AIRE (lb/h)
PORCENTAJE DE REMOCION
FLUJO AIRE SALIDA (lb/h)
Datos de salida

Para la parte de los filtros, los datos de entrada y salida son similares: Los datos de entrada están dados por el flujo de entrada de aire, amoniaco y gas de proceso respectivamente; los porcentajes de remoción de cada filtro y las concentraciones de partículas a filtrar en cada corriente.



Luego de dar *click* a cada uno de los botones “CALCULAR”, serán arrojados los valores de flujo de salida de aire, amoníaco y gas de proceso, además de los flujos de material filtrado en cada filtro.



Para culminar con el programa, se da “click” en el botón “SALIR” o se cierra la ventana.

Esta herramienta desarrollada es práctica para usos de operarios de planta, puesto que es de fácil implementación, pero permite obtener satisfactoriamente las condiciones de operación real de la planta y además realizar análisis de sensibilidad para evaluar posibles cambios en las condiciones de producción.