

Modelado de un Reactor Tubular Horizontal con Condensación, en Estado Estacionario

APLICACIÓN A UN PROCESO DE PRODUCCIÓN DE ÁCIDO NÍTRICO.

Resumen: Se propone una alternativa de modelado de un reactor tubular horizontal de carcasa y tubo, donde la alimentación es completamente gaseosa. Durante el enfriamiento de esta corriente gaseosa, el reactor se modeló como un PFR (Plug Flow Reactor) con servicio de enfriamiento en contracorriente, verificando la disminución de la temperatura con respecto al punto rocío de la mezcla, de modo que permita detectar la sección donde comienza la condensación. A partir de la formación de la fase líquida, la corriente de proceso avanza con un frente bifásico L-V en equilibrio y con reacciones químicas en ambas fases. Una secuencia de múltiples CSTR (Continuous Stirred Tank Reactor) en serie con enfriamiento y en estado estacionario, se propone como modelado del condensador en la etapa de flujo bifásico.

La aplicación de este modelo a un equipo de similares características, involucrado en el proceso de producción de ácido nítrico que dispone una empresa en Argentina, permitió la validación del modelado que se propone, a través de la constatación de los valores establecidos por el proveedor de su tecnología. El modelo propuesto predice satisfactoriamente las corrientes resultantes de una operación con las características descriptas.

Palabras Claves: Condensador Horizontal, Ácido Nítrico; PFR con Equilibrio de Fases; CSTR con Equilibrio de Fases; Flujo Bifásico.

Abstract: An alternative of modeling of a horizontal shell and tube reactor with completely gaseous feed was proposed. During the cooling of the gaseous stream, the reactor was modeled as a PFR (Plug Flow Reactor) with countercurrent cooling service; verifying the decrease in temperature as regards the dew point of the mixture so it would allow to detect the section where condensation begins. When the liquid phase has been formed, the process stream advances as plug flow biphasic L-V in equilibrium with chemical reactions in both phases. Then, it was proposed as a sequence of multiple CSTRs (Continuous Stirred Tank Reactors) in series in steady-state with cooling to model the two-phase-flow stage into condenser.

This model, applied to similar characteristics equipment involved in the nitric acid production process of a company in Argentina, has allowed the modeling validation proposed, through the values established by the technology provider for its comparison. The proposed model predicts the stream resulting from an operation with similar characteristics described successfully.

Keywords: Horizontal Condenser; Nitric Acid; Equilibrium Phases PFR; Equilibrium Phases CSTR; Biphasic Flow.

Gustavo I. Servetti, Héctor R. Macaño, Guillermo N. Ahumada

Centro de Investigación y Transferencia en Ingeniería Química Ambiental (CIQA) - Facultad Regional Córdoba
Universidad Tecnológica Nacional, Maestro M. López esq. Cruz Roja Argentina, Ciudad Universitaria, Córdoba, Argentina.

Mail: gservetti@ciqa.com.ar - Web: www.ciqa.com.ar

INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

Del Estudio de Impacto Ambiental de una nueva planta de producción de ácido nítrico surge la necesidad de un adecuado sistema de tratamiento de los gases $NxOy$ antes de ser emitidos a la atmósfera. El conocimiento de la evolución de estas especies contaminantes a lo largo del proceso, la posibilidad de predecir riesgos sobre determinados escenarios peligrosos durante la operación y la influencia sobre la rentabilidad de la producción, demandaron la modelación de dicho proceso para evaluar distintos escenarios a través de la simulación.

Hasta el momento, los simuladores comerciales han proporcionado adecuadas respuestas a demandas vinculadas principalmente a la performance de la columna de absorción reactiva, que constituye una de las operaciones más importantes en el proceso de producción de ácido nítrico. No obstante, el tren de reactores anterior a esta columna genera los gases precursores del ácido nítrico y eventualmente podrían constituir una fuente de contaminación, si son liberados a la atmósfera. Este tren de reacción cuenta con un reactor tubular homogéneo, del tipo intercambiador de carcasa y tubo, dispuesto horizontalmente y con enfriamiento en contracorriente, donde comenzará la condensación parcial de los gases reaccionantes recibidos de los reactores anteriores, iniciándose en esta misma instancia el progreso de las reacciones en la fase líquida, previo a la operación de la columna de absorción reactiva. Algunas particularidades relacionadas a la disposición de este equipo limita el uso de los simuladores comerciales. La performance conocida responde a estimaciones basadas en importantes consideraciones simplificadoras y/o determinaciones experimentales, ávida de un modelado riguroso que otorgue simulaciones predictivas confiables.

A partir de la necesidad de predicciones razonables

en la performance del proceso completo de producción de ácido nítrico, este trabajo tiene por objetivo generar una alternativa de modelación unidimensional para reactores tubulares con condensación parcial y flujo horizontal de ambas fases en cocorriente.

METODOLOGÍA

Modelo Conceptual

Se alimenta un mezcla gaseosa reaccionante exotérmica a un reactor tubular refrigerado con agua en contracorriente, que llamaremos “reactor – condensador” y en algún punto de este equipo se verifica la condensación parcial de los gases. Cuando se forma la fase líquida, se establece un equilibrio de fases L-V y además se desarrollan reacciones químicas tanto en la fase líquida como en la fase gaseosa. La consideración de un régimen de flujo turbulento ($Re > 3000$) permite su análisis unidimensional.

La existencia del equilibrio de fases L-V contempla la formación de un volumen líquido a expensas de los gases que se condensan y en cada sección del reactor – condensador, el volumen acumulado perdurará en el tiempo mientras dicha operación se mantenga en estado estacionario.

Tal como se observa en la Figura 1, en el primer tramo del reactor – condensador antes de la condensación, donde la mezcla reaccionante se mantiene únicamente en fase gaseosa, se modeló como un PFR gaseoso con enfriamiento en contracorriente. Adicional a ello se agrega la necesidad de chequear permanentemente el punto rocío de la mezcla para poder detectar la ubicación en el equipo donde se forma la primer gota de líquido. A partir de esta instancia: 1) el volumen de la fase líquida irá en aumento en la dirección axial

hacia la salida del reactor – condensador; 2) se desarrollan simultáneamente reacciones químicas en la fase gaseosa y en la fase líquida; 3) se puede considerar una secuencia de equilibrios de fases en la dirección axial hacia la salida del reactor – condensador. Debido a esto cuando el sistema comienza a condensar y evoluciona la fase líquida, se propone como modelo aquel que describe a una serie de CSTR bifásicos, en estado estacionario y con intercambio de calor.

El desarrollo de una serie de infinitos reactores CSTR, describe el comportamiento de un reactor PFR de volumen equivalente al acumulado de la serie, tal como se demuestra en Fogler (2008). La consideración de una serie de reactores perfectamente mezclados, bifásicos y no isotérmicos es más exacta

cuanto más pequeño es el elemento de volumen adoptado para cada reactor de la serie. Sin embargo, cuando el volumen de control adoptado es inferior al 2% del total calculado como serie de CSTR, ya no tiene impacto significativo sobre los resultados. Esto permite asumir que para el sistema en condensación hay un volumen crítico por debajo del cual, el reactor puede considerarse perfectamente mezclado y aplicar el modelo matemático que lo describe.

En un CSTR ideal en estado estacionario, no hay dependencia con el tiempo o la posición de la temperatura, la concentración, la velocidad de reacción y cualquier otra propiedad en cuestión. Es decir, todas las variables son iguales en todos los puntos del volumen de reacción. Para ambas fases acontecidas en

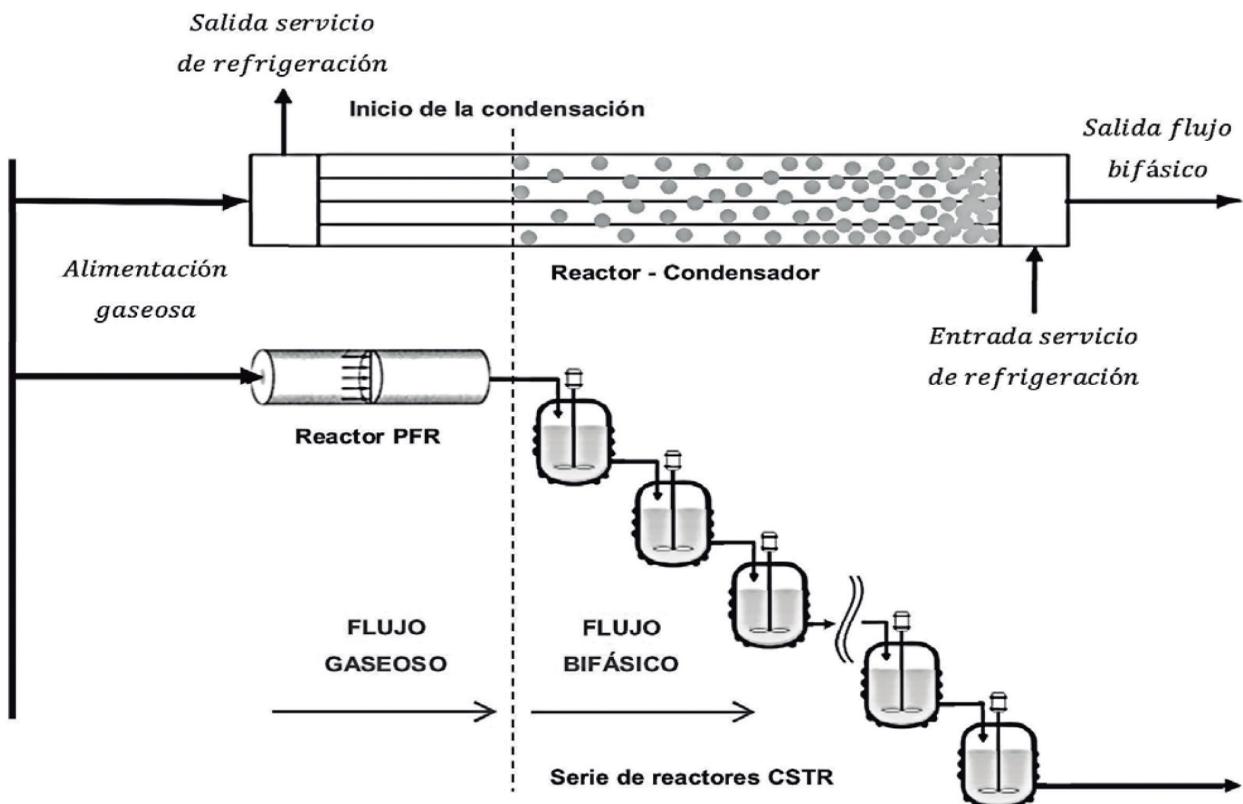


Figura 1. Esquema del modelo conceptual adoptado.

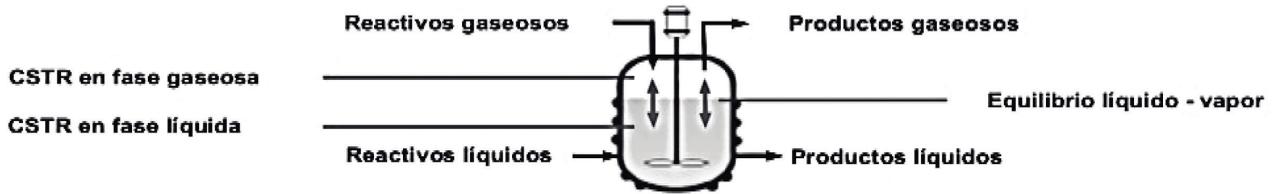


Figura 2. CSTR con equilibrio de fases L-V y reacción química en ambas fases.

No hay variación radial en las propiedades del sistema, y solo cambian con la variable longitudinal del reactor

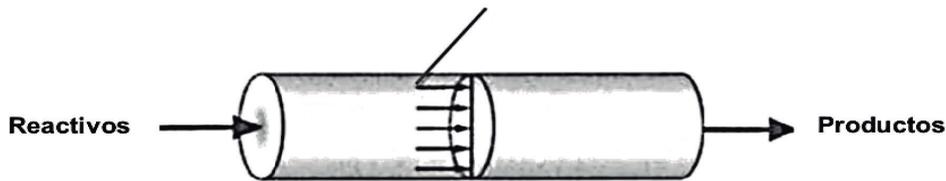


Figura 3. Modelo conceptual para un PFR gaseoso.

los CSTR involucrados en la serie, el mismo concepto es aplicable tanto para la fase líquida como gaseosa, estrechamente vinculadas entre sí por el equilibrio de fases. El esquema presentado en la Figura 2 representa el modelo conceptual adoptado para los CSTR.

El modelo conceptual para un PFR considera un perfil de flujo plano, es decir, un perfil de velocidades uniforme en toda la sección de la tubería de transporte, característico del flujo turbulento y que se esquematiza en la Figura 3. De acuerdo a esto, en un PFR no hay variación radial de la velocidad de reacción y sus cambios sólo se asocian a una determinada sección sobre su desarrollo longitudinal.

Cualquiera de los modelos conceptuales mencionados anteriormente, deben obedecer al principio general de conservación de la magnitud extensiva ϕ :

$$\left\{ \begin{matrix} \text{velocidad} \\ \text{de} \\ \text{entrada} \\ \text{de } \phi \end{matrix} \right\} - \left\{ \begin{matrix} \text{velocidad} \\ \text{de} \\ \text{salida} \\ \text{de } \phi \end{matrix} \right\} + \left\{ \begin{matrix} \text{velocidad} \\ \text{de} \\ \text{generación} \\ \text{de } \phi \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} \text{velocidad} \\ \text{de} \\ \text{acumulación} \\ \text{de } \phi \end{matrix} \right\}$$

Balance de Masa para un PFR

La expresión general para el balance de masa de un PFR se convierte en:

$$\frac{dF_{Gi}}{dV} = r_{Gnetai}$$

Donde F_{Gi} : Flujo molar de cada especie en la fase gaseosa; V : Volumen del reactor; r_{Gnetai} : Velocidad neta de reacción de cada especie en fase gaseosa.

Balance de Masa para un CSTR

La expresión general para el balance de masa del volumen de control considerado un CSTR componente de la serie, se convierte en:

$$F_{G0i} + F_{L0i} - F_{Gi} - F_{Li} + r_{Gnetai} * V_{elem} * \varepsilon + r_{Lnetai} * V_{elem} * (1 - \varepsilon) = 0$$

Donde F_{Gi} : Flujo molar de cada especie en fase gaseosa a la salida del reactor; F_{Li} : Flujo molar de cada especie en fase líquida a la salida del reactor; F_{G0i} : Flujo molar de alimentación de cada especie en

fase gaseosa; $F_{L_{oi}}$: Flujo molar de alimentación de cada especie en fase líquida; V_{elem} : Volumen del elemento de control considerado como reactor mezcla completa; $r_{G_{netai}}$: Velocidad neta de reacción de cada especie en fase gaseosa; $r_{L_{netai}}$: Velocidad neta de reacción de cada especie en fase líquida; ε : Fracción de flujo volumétrico gaseoso.

La fracción de flujo volumétrico gaseoso (ε) se define como la relación entre el caudal volumétrico del gas y el caudal volumétrico total. El parámetro ε establece la fracción de volumen del volumen de control considerado, ocupada por el gas:

$$\varepsilon = \frac{\left(\sum_{i=1}^{n_{especiesG}} F_{Gi}\right) * V_{Gmezcla}}{\left(\sum_{i=1}^{n_{especiesG}} F_{Gi}\right) * V_{Gmezcla} + \left(\sum_{i=1}^{n_{especiesL}} F_{Li}\right) * V_{Lmezcla}}$$

Donde $V_{Gmezcla}$: Volumen molar de mezcla gaseosa; $V_{Lmezcla}$: Volumen molar de mezcla líquida; F_{Gi} : Flujo molar de cada especie en fase gaseosa; F_{Li} : Flujo molar de cada especie en fase líquida; ε : Fracción de flujo volumétrico gaseoso.

Balance de Energía para un PFR

La expresión general para el balance de energía de un PFR para el sistema reaccionante se describe de la siguiente forma:

$$\frac{dT}{dV} = \frac{Q(T_a, T) - W - \sum_{i=1}^{n_{especiesG}} (r_{G_{netai}} * H_i)}{\sum_{i=1}^{n_{especiesG}} F_{Gi} * Cp_{Gi}}$$

Donde T: Temperatura del sistema de reacción; V: Volumen del reactor PFR; $Q_{Ta, T}$: Flujo de calor por unidad de volumen de reacción; W: Trabajo del sistema; H_i : Entalpía de cada especie gaseosa; C_{pGi} : Capacidad calorífica de cada especie gaseosa; F_{Gi} : Flujo molar de cada especie en fase gaseosa.

La expresión general para el balance de energía de un PFR para el servicio auxiliar se convierte en:

$$\frac{dT_a}{dV} = \frac{Q(T_a, T)}{F_{ref} * Cp_{ref}}$$

Donde T_a : Temperatura del refrigerante; V: Volumen del reactor PFR; $Q(T_a, T)$: Flujo de calor por unidad de volumen de reacción; F_{ref} : Flujo molar de refrigerante; Cp_{ref} : Capacidad calorífica del refrigerante.

El flujo de calor (Q) en un PFR, está determinado por la siguiente ecuación:

$$Q(T_a, T) = U_G * a * \Delta T = U_G * a * (T_a - T)$$

Donde U_G : Coeficiente global de transferencia de calor, fase gaseosa; a: Área de intercambio por unidad de volumen de reacción; ΔT : Diferencia entre la temperatura del fluido refrigerante y la del sistema de reacción.

$$\Delta T = T_a - T$$

T_a : es la temperatura del fluido refrigerante; T: Temperatura del sistema de reacción.

Balance de Energía para un CSTR

La expresión general para el balance de energía del volumen de control considerando un CSTR componente de la serie, se convierte en:

$$Q(T) - W + \sum_{i=1}^{n_{especiesG}} (F_{Goi} * H_i) + \sum_{i=1}^{n_{especiesL}} (F_{Loi} * h_i) - \sum_{i=1}^{n_{especiesG}} (F_{Gi} * H_i) - \sum_{i=1}^{n_{especiesL}} (F_{Li} * h_i) = 0$$

Donde Q(T): Flujo de calor por unidad de volumen de reacción; W: Trabajo del sistema; H_i : Entalpía de cada especie gaseosa; h_i : Entalpía de cada especie líquida; F_{Gi} : Flujo molar de cada especie en fase gaseosa a la salida del reactor; F_{Li} : Flujo molar de cada especie en fase líquida a la salida del reactor; F_{Goi} : Flujo molar de alimentación de cada especie en fase gaseosa; F_{Loi} : Flujo molar de alimen-

tación de cada especie en fase líquida.

El flujo de calor (Q) en un reactor CSTR está determinado por la siguiente ecuación:

$$Q(T) = F_{ref} * C_{p_{ref}} * \Delta T = F_{ref} * C_{p_{ref}} * (T_{a_{entrada}}(T) - T_{a_{salida}})$$

Donde F_{ref} : Flujo molar de refrigerante; $C_{p_{ref}}$: Capacidad calorífica del refrigerante; ΔT : Diferencia entre la temperatura de entrada y salida del fluido refrigerante.

$$\Delta T = T_{a_{entrada}}(T) - T_{a_{salida}}$$

$T_{a_{salida}}$: es la temperatura de salida del fluido refrigerante y es conocida a partir del cálculo del reactor inmediato anterior; $T_{a_{entrada}}(T)$: es la temperatura de entrada del fluido refrigerante. Esta variable es una incógnita y es una función de la temperatura del sistema de reacción, que está dada por la siguiente expresión:

$$T_{a_{entrada}}(T) = \frac{T_{a_{salida}} - T * \left(1 - e^{\left(\frac{-U * A}{F_{ref} * C_{p_{ref}}} \right)} \right)}{e^{\left(\frac{-U * A}{F_{ref} * C_{p_{ref}}} \right)}}$$

Donde U: Coeficiente global de transferencia de calor - sección del CSTR; A: Área de intercambio; T: Temperatura del sistema de reacción; ϵ : Fracción de flujo volumétrico gaseoso.

Equilibrio de Fases Líquido - Vapor

Para detectar la sección del reactor donde comienza la condensación se requiere un chequeo permanente del estado térmico de la mezcla a medida que avanzamos a lo largo del equipo, por lo que la programación del algoritmo contempla cálculos frecuentes del punto rocío de la mezcla. Cuando la temperatura del sistema de reacción alcance a la del punto rocío de la mezcla, puede considerarse que en esa sección comienza a formarse la fase líquida. A partir de aquí, el sistema debe modelarse como una serie de múltiples CSTR con

equilibrio de fases L-V y reacciones químicas en ambas fases, simultáneamente.

De acuerdo a lo anterior, una vez detectada la condensación, el modelo de CSTR debe integrar el conjunto de ecuaciones algebraicas que describen el equilibrio de fases dentro del volumen de control. La expresión de equilibrio de fases por componente, de acuerdo al modelo Φ/Φ es:

$$\frac{F_{Gi}}{F_{GT}} = \left(\frac{\Phi_L \left(\frac{F_{Li}}{F_{LT}}, T, P_T \right)_i}{\Phi_G \left(\frac{F_{Gi}}{F_{GT}}, T, P_T \right)_i} \right) * \frac{F_{Li}}{F_{LT}}$$

Donde F_{Gi} : Flujo molar de cada especie en fase gaseosa a la salida del reactor; F_{Li} : Flujo molar de cada especie en fase líquida a la salida del reactor; FGT: Flujo molar total gaseoso; F_{LT} : Flujo molar total líquido.

- $\Phi_L \left(\frac{F_{Li}}{F_{LT}}, T, P_T \right)_i$: Coeficiente de fugacidad del componente i, en la mezcla líquida.
- $\Phi_G \left(\frac{F_{Gi}}{F_{GT}}, T, P_T \right)_i$: Coeficiente de fugacidad del componente i, en la mezcla gaseosa.

Diagrama de Flujo Conceptual de Programación del Algoritmo

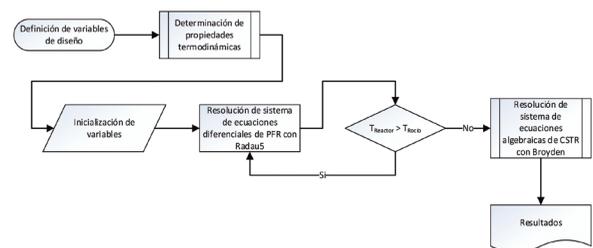


Figura 4. Diagrama de flujo para la programación del algoritmo.

METODOLOGÍA

Objeto de Estudio

El algoritmo descrito se aplicó para la simulación del reactor - condensador involucrado en el proceso de

producción de ácido nítrico de una empresa en argentina. La programación se realizó en Mathcad 15.0, sobre una PC Procesador Intel Core 4 GHz, Memoria (RAM) 16 GB, sistema operativo de 64 bits, 8 núcleos y el cálculo demandó 12.3 min.

Este equipo es un intercambiador del tipo carcasa y tubos montado en posición horizontal y se despreció la caída de presión. Por los tubos circula la mezcla reaccionante y por la carcasa circula el agua de refrigeración en contracorriente a razón de 68 [m³/hr]. La temperatura de salida del agua refrigerante no debería superar los 309 [K], para hacer posible el posterior servicio de una torre de enfriamiento.

- Cantidad: 91 [tubos].
- Diámetro exterior: 25.4 [mm].
- Espesor de pared: 2.11 [mm].
- Largo: 7320 [mm].
- Volumen total disponible de los 91 tubos: 0.235 [m³].
- Área de intercambio por unidad de volumen de reacción (a): 188.86 [m²/m³].

Especificaciones de la Alimentación

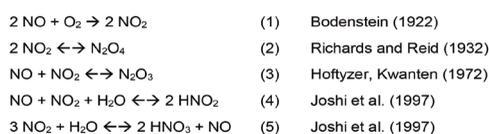
Especie	Fórmula	Flujo másico [kg/hr]
Amoniaco	NH ₃	0
Nitrógeno	N ₂	4524
Oxígeno	O ₂	358.80
Agua	H ₂ O	647.96
Óxido nítrico	NO	306.18
Dióxido de nitrógeno	NO ₂	468.52
Tetróxido de dinitrógeno	N ₂ O ₄	0.92
Trióxido de dinitrógeno	N ₂ O ₃	0
Ácido nitroso	HNO ₂	0
Ácido nítrico	HNO ₃	0
Óxido nítrico	N ₂ O	0
Total		6306.38

Tabla 1. Especificaciones de la alimentación.

En la Tabla 1 se establecen las especificaciones de la corriente que alimenta al reactor – condensador, de acuerdo a la información proporcionada por la empresa proveedora de la tecnología. La temperatura de la corriente es de 515 [K], la presión es de 7.31 [bar], fase gas.

Esquema de Reacciones en Fase Gaseosa

Se ha utilizado un esquema de cinco reacciones para describir el comportamiento del sistema reaccionante en la fase gaseosa. La más importante de ellas es la de oxidación del NO para generar NO₂. Esta es una reacción irreversible, originalmente estudiada por Bodenstein (1922). A partir de ésta, se desencadenan una serie de reacciones reversibles, dos de ellas evolucionan rápidamente hacia el equilibrio (reacciones (2) y (3)), mientras que las dos restantes son muy lentas (reacciones (4) y (5)). A continuación se presenta el esquema de las reacciones involucradas en esta etapa del proceso de producción de ácido nítrico.

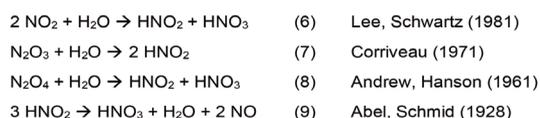


Esquema de Reacciones en Fase Líquida

Una vez obtenida la fase líquida, el ácido nítrico comienza a aparecer en mayor proporción, debido a que el esquema de reacciones en el líquido favorece la formación de dicha especie. Por lo que el reactor – condensador debe brindar las condiciones necesarias para bajar la temperatura de los gases, lograr condensar parte de ellos, y adecuar la alimentación a la siguiente operación que es la destilación reactiva.

El esquema de reacciones en la fase líquida queda

definido por cuatro reacciones irreversibles, según Hüpen, Kenig (2005). A través de las reacciones (6), (7) y (8), los óxidos de nitrógeno disueltos son transformados en ácido nítrico y nitroso. El NO producido por la reacción (9) se desorbe rápidamente a la fase gaseosa, dada su escasa solubilidad en la fase líquida. A continuación se presenta el conjunto de reacciones que evolucionan en la fase líquida en el proceso de producción de ácido nítrico.



La cinética asociada a las reacciones (6) y (7) fueron trabajadas y adecuadas por Kenig, Hüpen (2005), mientras que la asociada a las reacciones (8) y (9) por Hoffmann, Emig (1979), basada en los datos experimentales de Wendel, Pigford (1958).

Modelo Termodinámico Adoptado

La evaluación de las propiedades termodinámicas resulta esencial para la simulación. En este trabajo, se utilizaron datos publicados disponibles, y de no contar con los mismos, se estimaron. Se puede realizar una clasificación entre propiedades de sustancias puras y de mezclas. Para las propiedades de sustancias puras, temperatura de fusión, ebullición, peso molecular, temperatura crítica, presión crítica, volumen crítico, factor acéntrico y momento dipolar, se obtuvieron de Yaws (1996).

Los valores de propiedades térmicas, capacidad calorífica de líquido y de vapor, las entalpías de formación de las sustancias puras, se obtuvieron de Chase (1998) y Washburn et al. (2003)

Para el modelado de las propiedades de mezcla en

fase líquida y vapor, se utilizó el modelo VTPR (Volume Translated – Peng Robinson), Schmid et al. (2010), dado que la solución líquida es altamente no ideal, y algunos componentes se encuentran presentes en ambas fases (líquida y gaseosa) en condiciones superiores a su condición crítica. Los parámetros de interacción del modelo de Gex, se obtuvieron de Jakob et al. (2006) y Horstmann et al. (2005).

Los valores de propiedades de transporte, viscosidad de sustancias puras y de mezclas, conductividad térmica de los fluidos, se estimaron de Poling et al. (2004). Los coeficientes globales de transferencia de calor se estimaron de Massoud (2005).

Resultados Obtenidos de la Simulación

Se propuso un modelado de un reactor tubular horizontal con condensación. El proceso de producción de ácido nítrico que una empresa dispone en Argentina, involucra un equipo industrial con estas características y se utilizó para evaluar la capacidad predictiva del modelado propuesto. La empresa proveedora de la tecnología del proceso ha proporcionado el balance de masa y energía que permitió contrastar con los valores resultantes de la simulación. En las Tabla 2 y Tabla 3 se comparan los valores obtenidos de la simulación con los informados por la empresa proveedora de la tecnología.

La Figura 5 muestra el perfil de algunas variables del sistema, obtenido a lo largo del reactor – condensador. Puede observarse que la sección donde comenzaría la condensación se ubica aproximadamente a los 3682 mm desde la entrada – al 50.3% de su longitud total – y a partir de la cual se modeló como una serie de reactores CSTR.

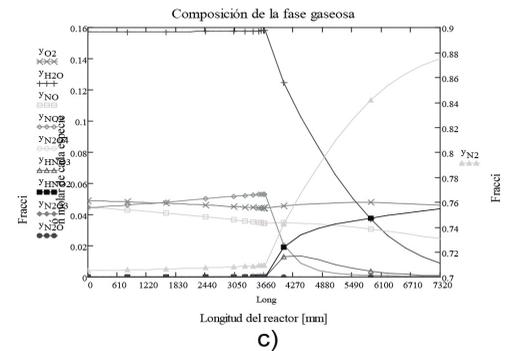
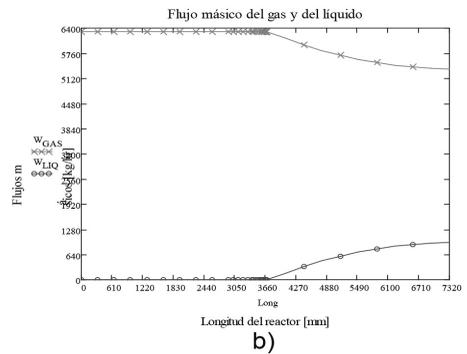
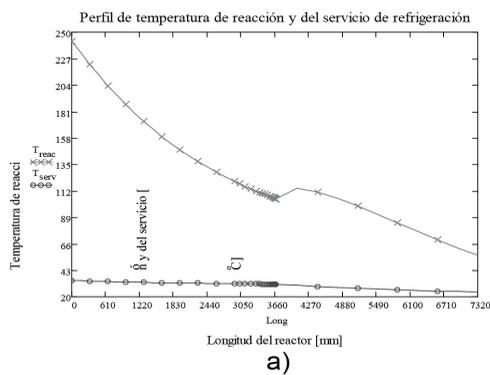
Especie	Fórmula	Flujo másico gaseoso a la salida del reactor - condensador [kg/hr]			Flujo másico líquido a la salida del reactor - condensador [kg/hr]		
		Provisto	Simulado	Dif %	Provisto	Simulado	Dif %
Amoníaco	NH ₃	0	0	-*	0	0	-*
Nitrógeno	N ₂	4524.1	4524.19	2*10 ⁻³	0	0.09	-*
Oxígeno	O ₂	199.67	271.86	26	0	8.9*10 ⁻³	-*
Agua	H ₂ O	29.38	30	2	552.99	475.77	-14
Óxido nítrico	NO	116.09	136.19	15	0	0.12	-*
Dióxido de nitrógeno	NO ₂	-*	3.36	-*	0	0.31	-*
Tetróxido de dinitrógeno	N ₂ O ₄	-*	0.012	-*	-*	4.8*10 ⁻⁴	-*
Trióxido de dinitrógeno	N ₂ O ₃	-*	0.04	-*	-*	1.8*10 ⁻³	-*
Ácido nitroso	HNO ₂	415.89	380.44	-8.5	13.01	1.27	-*
Ácido nítrico	HNO ₃	2.81	9.69	71	452.44	473.30	4.4
Óxido nitroso	N ₂ O	-*	0	-*	-*	0	-*
Total		5287.94	5355.78	1.3	1018.44	950.87	-6.6

* Valores no informados por la empresa

Tabla 2. Comparación de los flujos másicos resultantes de la simulación con los provistos por la empresa proveedora de la tecnología.

Temperatura de salida del sistema de reacción [K]		Dif %
Provista	Simulada	
323 (50 °C)	329 (56 °C)	1.8

Tabla 3. Comparación de la temperatura.



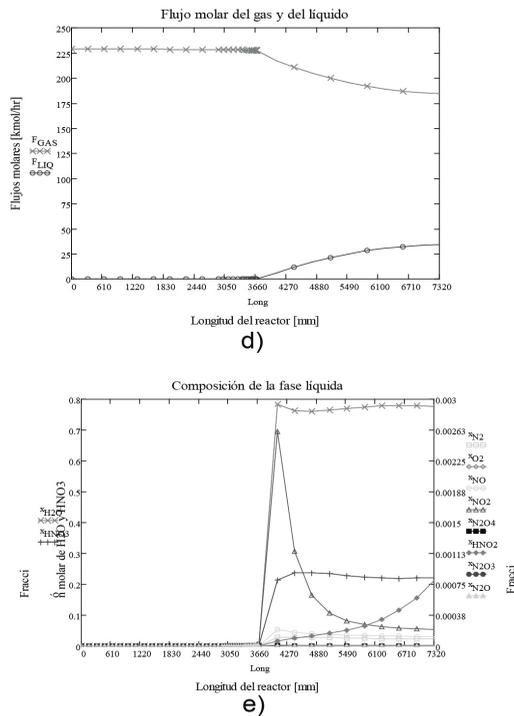


Figura 5. Perfil longitudinal del reactor - condensador:
 a) Temperatura de reacción y del servicio de refrigeración;
 b) Flujo másico del gas y del líquido; c) Composición de la fase gaseosa; d) Flujo molar del gas y del líquido; e) Composición de la fase líquida.

CONCLUSIONES

La comparación de los resultados obtenidos de la simulación con los proporcionados por la empresa

proveedora de la tecnología del proceso de producción de ácido nítrico, indica que el modelado planteado predice adecuadamente la performance de un reactor tubular horizontal con condensación, en régimen de flujo turbulento y despreciando la caída de presión.

La simulación ha predicho 1.3% mayor el flujo másico total de la fase vapor y 6.6% menor el de la fase líquida. La temperatura difiere 1.8% de la provista. La distribución de las distintas especies es aceptable, presentando mayores diferencias en los flujos gaseosos de las especies O_2 , NO y HNO_3 , que intervienen en menor proporción frente al flujo másico total. La distribución de los flujos másicos de las distintas especies en la fase líquida señalan una aceptable capacidad predictiva de la simulación. Hay buena coincidencia en los componentes mayoritarios de la mezcla “agua” y “ácido nítrico”, lo cual resulta razonable teniendo en cuenta que es la solución que se pretende producir.

Está previsto, con la puesta en marcha de la planta, comparar los resultados de una simulación que incluye la generación de N_2O en el reactor de síntesis y por consiguiente forme parte de la alimentación de este reactor - condensador, con datos experimentales.

REFERENCIAS

- Abel, E. (1928). *Z Phys. Chem.*, 132, 55 – 63; 134, 279 – 301.
- Andrew, S. (1961). *Chem. Eng. Sci.*, 28, 105 – 114.
- Bodenstein, M. (1922). *Z Phys. Chem.*, 100, 68 – 123.
- Chase, M. (1998). *Janaf Thermochemical Tables, 4th Edition*. NIST.
- Corriveau, C. (1971). *Master Thesis*. University of California, Berkley.
- Fogler, S., (2008). *Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas*. México: Pearson Educación.
- Hoffmann, U. (1979). *Chem. Ing. Tech*, 51, 5, 516 – 517.
- Hoftyzer, P. (1972). *Gas Purification Processes for Air Pollution Control*. Butterworths, London.
- Horstmann, S. et al. (2005). *PSRK group contribution equation of state: comprehensive revision and extension IV, including critical constants and α -function parameters for 1000 components*. *Fluid Phase Equilibria*, 227, 157–164.
- Jakob, A. et al. (2006). *Further Development of Modified UNIFAC (Dortmund): Revision and Extension 5*. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 45, 7924-7933.
- Joshi, J. (1997). *Multicomponent gas absorption with multiple reactions: modeling and simulation of NOx absorption in nitric acid manufacture*. *Chem. Eng. Sci.*, 52, 24, 4569 – 4591.
- Joshi, J. (1985). *Absorption of NOx gases*. *Chem. Eng. Communications*, 33, 1 – 92.
- Joshi, J. (2008). *Modeling, simulation and optimization: Mono pressure nitric acid process*. *Chem. Eng. Journal*, 138, 556 – 577.
- Kenig, Y. (2005). *Rigorous modeling of NOx absorption in tray and packed columns*. *Chem. Eng. Sci.*, 60, 6462 – 6471.
- Lee, Y. (1981). *Reaction kinetics of nitrogen dioxide with liquid water at low pressure*. *Journal of Phys. Chem.*, 85, 840 – 848.
- Massoud, M., (2005). *Engineering Thermofluids. Thermodynamics, Fluid Mechanics, and Heat Transfer*. Springer-Verlag.
- Poling, B. (2004). *The properties of Gases and Liquids*. 5th edition. McGrawHill.
- Richards, W. (1932). *J. Am. Chem. Soc.*, 54, 3014 – 3015.
- Schmid, B. (2010). *From van der Waals to VTPR: The systematic improvement of the van der Waals equation of state*. *J. of Supercritical Fluids*, 55, 438-447.
- Washburn E.W., et al (2003). *International Critical Tables of Numerical Data, Physics, Chemistry and Technology*. Knovel.
- Wendel, M. (1958). *AIChE*, 4, 3, 249 – 256.
- Yaws, C. (1996). *Handbook of Thermodynamic Diagrams, Vol. 4, Inorganic Compounds and Elements*. Gulf Publishing Company.