

Equilibrio de formación de SO3 Base 1 kmol de entrada de S a oxidación: S + O2 = SO2

Composición inicial con aire en exceso para obtener una concentración de SO2 de un 10%

Copyright J.I. Zubizarreta

Base 1 kmol de SO2 en 10 kmol de mezcla total de gases

$$O_{2\text{estequiométrico}} = 0,5 \text{ [kmol]}$$

$$N_{2\text{estequiométrico}} = 0,5 \cdot \frac{0,79}{0,21} \cdot 1 \text{ [kmol]}$$

$$Aire_{\text{exceso}} + N_{2\text{estequiométrico}} + O_{2\text{estequiométrico}} = 9 \text{ [kmol]}$$

$$Total_{\text{gas}} = 10 \text{ [kmol]}$$

$$y_{0SO3} = 0$$

$$y_{0SO2} = 0,1 \text{ Son 10 kmol de gas total}$$

$$y_{0N2} = \frac{Aire_{\text{exceso}} \cdot 0,79 + N_{2\text{estequiométrico}}}{Total_{\text{gas}}}$$

$$y_{0O2} = \frac{Aire_{\text{exceso}} \cdot 0,21 + O_{2\text{estequiométrico}}}{Total_{\text{gas}}}$$

Condiciones de entrada

$$P = 1,1 \text{ [atm]} \cdot [1 - 0,5 \cdot \alpha]$$

Constante de equilibrio para la reacción SO2 + 1/2O2 = SO3

$$\text{Call JANAF} ['SO3'; T : CP_{SO3} ; H_{SO3} ; S_{SO3}]$$

$$\text{Call JANAF} ['O2'; T : CP_{O2} ; H_{O2} ; S_{O2}]$$

$$\text{Call JANAF} ['SO2'; T : CP_{SO2} ; H_{SO2} ; S_{SO2}]$$

$$R = 8,314 \text{ [kJ/kmol-K]}$$

$$-R \cdot T \cdot \ln [K_{SO3}] = H_{SO3} - T \cdot S_{SO3} - 1/2 \cdot [H_{O2} - T \cdot S_{O2}] - [H_{SO2} - T \cdot S_{SO2}]$$

$$y_{SO3} = \frac{y_{0SO3} + \alpha}{1 - 0,5 \cdot \alpha}$$

$$y_{SO2} = \frac{y_{0SO2} - \alpha}{1 - 0,5 \cdot \alpha}$$

$$y_{N2} = \frac{y_{0N2}}{1 - 0,5 \cdot \alpha}$$

$$y_{O2} = \frac{y_{0O2} - 1/2 \cdot \alpha}{1 - 0,5 \cdot \alpha}$$

$$K_{SO_3} = P \cdot \frac{\frac{y_{SO_3}}{1 \text{ [atm]}}}{P \cdot \frac{y_{SO_2}}{1 \text{ [atm]}}} \cdot \left[P \cdot \frac{y_{O_2}}{1 \text{ [atm]}} \right]^{0.5}$$

$$t_c = T - 273,15 \text{ [K]}$$

$$\text{Conversion} = [y_{0SO_2} - y_{SO_2}] \cdot \frac{100}{y_{0SO_2}}$$

$$T_0 = 400 \text{ [C]} + 273,15 \text{ [K]}$$

$$\text{Call JANAF} ['SO_3'; T_0 : CP_{SO_3,0} ; H_{SO_3,0} ; S_{SO_3,0}]$$

$$\text{Call JANAF} ['O_2'; T_0 : CP_{O_2,0} ; H_{O_2,0} ; S_{O_2,0}]$$

$$\text{Call JANAF} ['SO_2'; T_0 : CP_{SO_2,0} ; H_{SO_2,0} ; S_{SO_2,0}]$$

$$\text{Call JANAF} ['N_2'; T_0 : CP_{N_2,0} ; H_{N_2,0} ; S_{N_2,0}]$$

$$y_{SO_3,0} = y_{0SO_3}$$

$$y_{SO_2,0} = y_{0SO_2}$$

$$y_{N_2,0} = y_{0N_2}$$

$$y_{O_2,0} = y_{0O_2}$$

$$H_0 = y_{SO_3,0} \cdot H_{SO_3,0} + y_{SO_2,0} \cdot H_{SO_2,0} + y_{N_2,0} \cdot H_{N_2,0} + y_{O_2,0} \cdot H_{O_2,0}$$

$$\text{Conv}_0 = 0$$

$$t_{c,0} = T_0 - 273,15 \text{ [K]}$$

Lecho n° 1

$$\text{Conv}_1 = 66$$

$$\text{Conv}_1 = [y_{0SO_2} - y_{SO_2,1}] \cdot \frac{100}{y_{0SO_2}}$$

$$y_{SO_3,1} = \frac{y_{0SO_3} + \alpha_1}{1 - 0,5 \cdot \alpha_1}$$

$$y_{SO_2,1} = \frac{y_{0SO_2} - \alpha_1}{1 - 0,5 \cdot \alpha_1}$$

$$y_{N_2,1} = \frac{y_{0N_2}}{1 - 0,5 \cdot \alpha_1}$$

$$y_{O_2,1} = \frac{y_{0O_2} - 1 / 2 \cdot \alpha_1}{1 - 0,5 \cdot \alpha_1}$$

$$\text{Call JANAF} ['SO_3'; T_1 : CP_{SO_3,1} ; H_{SO_3,1} ; S_{SO_3,1}]$$

$$\text{Call JANAF} \left['O_2'; T_1 : CP_{O_2,1} ; H_{O_2,1} ; S_{O_2,1} \right]$$

$$\text{Call JANAF} \left['SO_2'; T_1 : CP_{SO_2,1} ; H_{SO_2,1} ; S_{SO_2,1} \right]$$

$$\text{Call JANAF} \left['N_2'; T_1 : CP_{N_2,1} ; H_{N_2,1} ; S_{N_2,1} \right]$$

$$H_1 = y_{SO_3,1} \cdot H_{SO_3,1} + y_{SO_2,1} \cdot H_{SO_2,1} + y_{N_2,1} \cdot H_{N_2,1} + y_{O_2,1} \cdot H_{O_2,1}$$

$$H_0 = H_1$$

$$tc_1 = T_1 - 273,15 \text{ [K]}$$

Enfriamiento hasta 450 °C. Q es el calor intercambiado

$$tc_2 = 450$$

$$tc_2 = T_2 - 273,15 \text{ [K]}$$

$$\text{Conv}_2 = \text{Conv}_1$$

$$\text{Call JANAF} \left['SO_3'; T_2 : CP_{SO_3,2} ; H_{SO_3,2} ; S_{SO_3,2} \right]$$

$$\text{Call JANAF} \left['O_2'; T_2 : CP_{O_2,2} ; H_{O_2,2} ; S_{O_2,2} \right]$$

$$\text{Call JANAF} \left['SO_2'; T_2 : CP_{SO_2,2} ; H_{SO_2,2} ; S_{SO_2,2} \right]$$

$$\text{Call JANAF} \left['N_2'; T_2 : CP_{N_2,2} ; H_{N_2,2} ; S_{N_2,2} \right]$$

$$H_2 = y_{SO_3,1} \cdot H_{SO_3,2} + y_{SO_2,1} \cdot H_{SO_2,2} + y_{N_2,1} \cdot H_{N_2,2} + y_{O_2,1} \cdot H_{O_2,2}$$

$$Q_2 = H_1 - H_2$$

Lecho nº 2

$$\text{Conv}_3 = 90$$

$$\text{Conv}_3 = [y_{O_{SO_2}} - y_{SO_2,3}] \cdot \frac{100}{y_{O_{SO_2}}}$$

$$y_{SO_3,3} = \frac{y_{O_{SO_3}} + \alpha_3}{1 - 0,5 \cdot \alpha_3}$$

$$y_{SO_2,3} = \frac{y_{O_{SO_2}} - \alpha_3}{1 - 0,5 \cdot \alpha_3}$$

$$y_{N_2,3} = \frac{y_{O_{N_2}}}{1 - 0,5 \cdot \alpha_3}$$

$$y_{O_2,3} = \frac{y_{O_{O_2}} - 1 / 2 \cdot \alpha_3}{1 - 0,5 \cdot \alpha_3}$$

$$\text{Call JANAF} \left['SO_3'; T_3 : CP_{SO_3,3} ; H_{SO_3,3} ; S_{SO_3,3} \right]$$

$$\text{Call JANAF} \left['O_2'; T_3 : CP_{O_2,3} ; H_{O_2,3} ; S_{O_2,3} \right]$$

$$\text{Call JANAF} \left['SO_2'; T_3 : CP_{SO_2,3} ; H_{SO_2,3} ; S_{SO_2,3} \right]$$

$$\text{Call JANAF} \left['N_2'; T_3 : CP_{N_2,3} ; H_{N_2,3} ; S_{N_2,3} \right]$$

$$H_3 = y_{SO3,3} \cdot H_{SO3,3} + y_{SO2,3} \cdot H_{SO2,3} + y_{N2,3} \cdot H_{N2,3} + y_{O2,3} \cdot H_{O2,3}$$

$$H_2 = H_3$$

$$tc_3 = T_3 - 273,15 \text{ [K]}$$

Enfriamiento hasta 400 °C. Q es el calor intercambiado

$$tc_4 = 400$$

$$tc_4 = T_4 - 273,15 \text{ [K]}$$

$$Conv_4 = Conv_3$$

$$\text{Call JANAF} ['SO3'; T_4 : CP_{SO3,4} ; H_{SO3,4} ; S_{SO3,4}]$$

$$\text{Call JANAF} ['O2'; T_4 : CP_{O2,4} ; H_{O2,4} ; S_{O2,4}]$$

$$\text{Call JANAF} ['SO2'; T_4 : CP_{SO2,4} ; H_{SO2,4} ; S_{SO2,4}]$$

$$\text{Call JANAF} ['N2'; T_4 : CP_{N2,4} ; H_{N2,4} ; S_{N2,4}]$$

$$H_4 = y_{SO3,4} \cdot H_{SO3,4} + y_{SO2,4} \cdot H_{SO2,4} + y_{N2,4} \cdot H_{N2,4} + y_{O2,4} \cdot H_{O2,4}$$

$$Q_4 = H_3 - H_4$$

Lecho nº 3

$$Conv_5 = 98$$

$$Conv_5 = [y_{O_{SO2}} - y_{SO2,5}] \cdot \frac{100}{y_{O_{SO2}}}$$

$$y_{SO3,5} = \frac{y_{O_{SO3}} + \alpha_5}{1 - 0,5 \cdot \alpha_5}$$

$$y_{SO2,5} = \frac{y_{O_{SO2}} - \alpha_5}{1 - 0,5 \cdot \alpha_5}$$

$$y_{N2,5} = \frac{y_{O_{N2}}}{1 - 0,5 \cdot \alpha_5}$$

$$y_{O2,5} = \frac{y_{O_{O2}} - 1 / 2 \cdot \alpha_5}{1 - 0,5 \cdot \alpha_5}$$

$$\text{Call JANAF} ['SO3'; T_5 : CP_{SO3,5} ; H_{SO3,5} ; S_{SO3,5}]$$

$$\text{Call JANAF} ['O2'; T_5 : CP_{O2,5} ; H_{O2,5} ; S_{O2,5}]$$

$$\text{Call JANAF} ['SO2'; T_5 : CP_{SO2,5} ; H_{SO2,5} ; S_{SO2,5}]$$

$$\text{Call JANAF} ['N2'; T_5 : CP_{N2,5} ; H_{N2,5} ; S_{N2,5}]$$

$$H_5 = y_{SO3,5} \cdot H_{SO3,5} + y_{SO2,5} \cdot H_{SO2,5} + y_{N2,5} \cdot H_{N2,5} + y_{O2,5} \cdot H_{O2,5}$$

$$H_4 = H_5$$

$$tc_5 = T_5 - 273,15 \quad [K]$$

Enfriamiento hasta 400 °C. Q es el calor intercambiado

$$tc_6 = 400$$

$$tc_6 = T_6 - 273,15 \quad [K]$$

$$Conv_6 = Conv_5$$

$$\text{Call JANAF} ['SO3'; T_6 : CP_{SO3,6} ; H_{SO3,6} ; S_{SO3,6}]$$

$$\text{Call JANAF} ['O2'; T_6 : CP_{O2,6} ; H_{O2,6} ; S_{O2,6}]$$

$$\text{Call JANAF} ['SO2'; T_6 : CP_{SO2,6} ; H_{SO2,6} ; S_{SO2,6}]$$

$$\text{Call JANAF} ['N2'; T_6 : CP_{N2,6} ; H_{N2,6} ; S_{N2,6}]$$

$$H_6 = y_{SO3,5} \cdot H_{SO3,6} + y_{SO2,5} \cdot H_{SO2,6} + y_{N2,5} \cdot H_{N2,6} + y_{O2,5} \cdot H_{O2,6}$$

$$Q_6 = H_5 - H_6$$

Lecho nº 4

$$Conv_7 = 99$$

$$Conv_7 = [y_{O_{SO2}} - y_{SO2,7}] \cdot \frac{100}{y_{O_{SO2}}}$$

$$y_{SO3,7} = \frac{y_{O_{SO3}} + \alpha_7}{1 - 0,5 \cdot \alpha_7}$$

$$y_{SO2,7} = \frac{y_{O_{SO2}} - \alpha_7}{1 - 0,5 \cdot \alpha_7}$$

$$y_{N2,7} = \frac{y_{O_{N2}}}{1 - 0,5 \cdot \alpha_7}$$

$$y_{O2,7} = \frac{y_{O_{O2}} - 1 / 2 \cdot \alpha_7}{1 - 0,5 \cdot \alpha_7}$$

$$\text{Call JANAF} ['SO3'; T_7 : CP_{SO3,7} ; H_{SO3,7} ; S_{SO3,7}]$$

$$\text{Call JANAF} ['O2'; T_7 : CP_{O2,7} ; H_{O2,7} ; S_{O2,7}]$$

$$\text{Call JANAF} ['SO2'; T_7 : CP_{SO2,7} ; H_{SO2,7} ; S_{SO2,7}]$$

$$\text{Call JANAF} ['N2'; T_7 : CP_{N2,7} ; H_{N2,7} ; S_{N2,7}]$$

$$H_7 = y_{SO3,7} \cdot H_{SO3,7} + y_{SO2,7} \cdot H_{SO2,7} + y_{N2,7} \cdot H_{N2,7} + y_{O2,7} \cdot H_{O2,7}$$

$$H_6 = H_7$$

$$tc_7 = T_7 - 273,15 \quad [K]$$

SOLUTION

Unit Settings: [kJ]/[K]/[bar]/[kmol]/[degrees]

(Table 2, Run 10)

Aire_{exceso} = 6,619 [kmol]

Conversion = 74,23

CP_{SO2} = 53,49H_{O2} = 19007 [kJ/kmol]H_{SO3} = -356709 [kJ/kmol]N_{2estequiométrico} = 1,881 [kmol]

P = 1,059 [atm]

S_{O2} = 239,6 [kJ/kmol-K]S_{SO3} = 326,2 [kJ/kmol-K]Total_{gas} = 10 [kmol]y_{O2} = 0,711y_{SO2} = 0,1y_{N2} = 0,7388y_{SO2} = 0,02577 α = 0,0752CP_{O2} = 34,33CP_{SO3} = 74,4H_{SO2} = -268159 [kJ/kmol]K_{SO3} = 7,431O_{2estequiométrico} = 0,5 [kmol]

R = 8,314 [kJ/kmol-K]

S_{SO2} = 299,5 [kJ/kmol-K]

T = 893,1 [K]

t_c = 620 [C]y_{O2} = 0,189y_{SO3} = 0y_{O2} = 0,1573y_{SO3} = 0,07814

No unit problems were detected.

Arrays Table

	CP _{N2,i}	CP _{O2,i}	CP _{SO2,i}	CP _{SO3,i}	H _{N2,i} [kJ/kmol]	H _{O2,i} [kJ/kmol]	H _{SO2,i} [kJ/kmol]	H _{SO3,i} [kJ/kmol]	S _{N2,i}
0	30,56	32,74	50,51	69,68	11111	11617	-279632	-372613	215,5
1	32,01	34,29	53,41	74,28	17762	18754	-268554	-357258	224,1
2	30,89	33,16	51,36	71,04	12647	13265	-277085	-369094	217,7
3	31,42	33,74	52,43	72,74	15009	15801	-273149	-363641	220,9
4	30,56	32,74	50,51	69,68	11111	11617	-279632	-372613	215,5
5	30,73	32,96	50,96	70,41	11904	12467	-278320	-370801	216,7
6	30,56	32,74	50,51	69,68	11111	11617	-279632	-372613	215,5
7	30,58	32,77	50,57	69,78	11210	11723	-279468	-372387	215,7

Arrays Table

	S _{O2,i}	S _{SO2,i}	S _{SO3,i}	T _i	H _i [kJ/kmol]	y _{N2,i}	y _{O2,i}	y _{SO2,i}	y _{SO3,i}	Conv _i
0	230,1	284,8	305,8	673,2	-17868	0,711	0,189	0,1	0	0
1	239,3	299,1	325,6	885,8	-17868	0,7357	0,1608	0,034	0,06947	66
2	232,4	288,5	310,8	723,2	-23625					66
3	235,8	293,6	318	799	-23625	0,7447	0,1506	0,01	0,09474	90
4	230,1	284,8	305,8	673,2	-28073					90
5	231,3	286,7	308,4	699	-28073	0,7477	0,1472	0,002	0,1032	98
6	230,1	284,8	305,8	673,2	-28980					98
7	230,2	285	306,1	676,4	-28980	0,748	0,1467	0,001	0,1042	99

Arrays Table

	t _{c,i}	α_i	Q _i
0	400		
1	612,6	0,06714	
2	450		5758
3	525,8	0,09045	
4	400		4448
5	425,9	0,0981	
6	400		907,1
7	403,2	0,09905	

Parametric Table: Table 2

	t_c [C]	y_{SO_2}	P [atm]	Conversion
Run 1	390	0,0003626	1,045	99,64
Run 2	415,6	0,0007021	1,045	99,3
Run 3	441,1	0,001292	1,046	98,71
Run 4	466,7	0,002266	1,046	97,73
Run 5	492,2	0,003799	1,047	96,2
Run 6	517,8	0,00609	1,048	93,91
Run 7	543,3	0,00934	1,05	90,66
Run 8	568,9	0,0137	1,052	86,3
Run 9	594,4	0,01921	1,055	80,79
Run 10	620	0,02577	1,059	74,23

