

Este programa integra las ecuaciones diferenciales que definen un HT-Shift Converter. Copyright J.I. Zubizarreta

La ecuación cinética procede del libro Slack & Russell Ammonia Part II con el catalizador ICI 15-5

El factor de envejecimiento, el efecto de presión y concentración de H₂S se han tomado de Singh & Saraf; Simulation of High-Temperature Shift Reactors; Ind. Eng. Chem., Process Des. Dev., Vol. 16, No. 3, 1977

$$\tau = 100 \quad \text{Días de vida del catalizador}$$

$$P = 30,2 \quad [\text{bar}] \quad \text{Presión de operación}$$

$$T_0 = 350 + 273,15 \quad \text{Temperatura de entrada}$$

$$G = 9524 \quad [\text{kmol/h}] \quad \text{Flujo de entrada}$$

$$\text{H}_2\text{S} = 5 \quad \text{Contenido de H}_2\text{S del gas en ppm}$$

Composición de gases en la entrada al reactor

$$\text{H}_{20} = \frac{31,43}{100}$$

$$\text{CO}_0 = \frac{8,59}{100}$$

$$\text{CO}_{20} = \frac{6,53}{100}$$

$$\text{H}_2\text{O}_0 = \frac{40,29}{100}$$

$$\text{CH}_4 = \frac{0,1785}{100}$$

$$\text{N}_2 = \frac{12,98}{100}$$

Determinación de la energía libre de Gibbs para cada especie química de la reacción a T y a la presión de referencia de 1 bar

$$P_{\text{ref}} = 1 \quad [\text{bar}]$$

$$R = 8,314 \quad [\text{kJ/kmol-K}] \quad \text{Constante de la ecuación de los gases perfectos}$$

$$g_{\text{CO}_2}^0 = h ['\text{CO}_2'; T=T] - T \cdot s ['\text{CO}_2'; T=T; P=P_{\text{ref}}]$$

$$g_{\text{CO}}^0 = h ['\text{CO}'; T=T] - T \cdot s ['\text{CO}'; T=T; P=P_{\text{ref}}]$$

$$g_{\text{H}_2}^0 = h ['\text{H}_2'; T=T] - T \cdot s ['\text{H}_2'; T=T; P=P_{\text{ref}}]$$

$$g_{\text{H}_2\text{O}}^0 = h ['\text{H}_2\text{O}'; T=T] - T \cdot s ['\text{H}_2\text{O}'; T=T; P=P_{\text{ref}}]$$

Incremento de la energía libre de Gibbs para la reacción CO+H₂O=CO₂+H₂

$$\Delta G_1^0 = g_{\text{H}_2}^0 + g_{\text{CO}_2}^0 - g_{\text{CO}}^0 - g_{\text{H}_2\text{O}}^0$$

$$\Delta G_1^0 = -R \cdot T \cdot \ln [K_1] \quad \text{Constante de equilibrio de la reacción 1}$$

$$\Delta H^0 = h ['\text{CO}_2'; T=T] + h ['\text{H}_2'; T=T] - h ['\text{CO}'; T=T] - h ['\text{H}_2\text{O}'; T=T] \quad \text{Entalpía molar de la reacción de conversión}$$

$$\begin{aligned} C_p = & \text{H}_2 \cdot C_p ['\text{H}_2'; T=T] + \text{CO} \cdot C_p ['\text{CO}'; T=T] + \text{CO}_2 \cdot C_p ['\text{CO}_2'; T=T] + \text{H}_2\text{O} \cdot C_p ['\text{H}_2\text{O}'; T=T] \\ & + \text{CH}_4 \cdot C_p ['\text{CH}_4'; T=T] + \text{N}_2 \cdot C_p ['\text{N}_2'; T=T] \end{aligned}$$

$$\text{CO} = \text{CO}_0 - x$$

$$\text{H}_2\text{O} = \text{H}_2\text{O}_0 - x$$

$$\text{CO}_2 = \text{CO}_{20} + x$$

$$\text{H}_2 = \text{H}_{20} + x$$

$$\log [A_f] = - [0,001466 - 0,000002 \text{ [K}^{-1}] \cdot T] \cdot \tau \quad \text{Aging factor, Factor de actividad por la edad del catalizador}$$

$$f_s = -0,276 \cdot \log [\text{H}_2\text{S} + 2,78] + 1,127 \quad \text{Factor de actividad en función del contenido de H}_2\text{S}$$

$$G \cdot dx dV = 1,5 \cdot 42,665 \cdot \frac{2,37}{2,67} \cdot 3,6 \text{ [kmol}\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{m}^{-3}] \cdot A_f \cdot f_s \cdot \exp \left[\frac{11500}{1,987 \cdot 706,15} \right] \cdot \exp \left[\frac{-11500 \text{ [K]}}{1,987 \cdot T} \right] \\ \cdot \sqrt{\frac{P}{1 \text{ [bar]}}} \cdot \text{CO} \cdot \left[1 - \text{CO}_2 \cdot \frac{\text{H}_2}{\text{CO} \cdot \text{H}_2\text{O} \cdot K_1} \right]$$

= r, Velocidad de reacción

$$dT dV = -\Delta H^0 \cdot \frac{dx dV}{C_p} = -\text{deltaH}^0 \cdot r / G$$

$$x = 0 + \int_0^{64,5} [dx dV] dV \quad x \text{ como una función del volumen entre 0 y 64,5 m}^3$$

$$T = T_0 + \int_0^{64,5} [dT dV] dV \quad T \text{ como una función del volumen entre 0 y 64,5 m}^3$$

SOLUTION

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

$$A_f = 0,9852$$

$$\text{CO} = 0,01639$$

$$\text{CO}_{20} = 0,0653$$

$$C_p = 35,09 \text{ [kJ/kmol}\cdot\text{K]}$$

$$\Delta H^0 = -37918 \text{ [kJ/kmol]}$$

$$dx dV = 0,00000899 \text{ [m}^{-3}]$$

$$G = 9524 \text{ [kmol/h]}$$

$$g_{\text{CO}_2}^0 = -551337 \text{ [kJ/kmol]}$$

$$g_{\text{H}_2\text{O}}^0 = -380775 \text{ [kJ/kmol]}$$

$$\text{H}_2\text{O} = 0,3334$$

$$\text{H}_2\text{S} = 5$$

$$K_1 = 9,522$$

$$P = 30,2 \text{ [bar]}$$

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

$$\tau = 100$$

$$V = 64,5 \text{ [m}^3]$$

$$\text{CH}_4 = 0,001785$$

$$\text{CO}_2 = 0,1348$$

$$\text{CO}_0 = 0,0859$$

$$\Delta G_1^0 = -13125 \text{ [kJ/kmol]}$$

$$dT dV = 0,009714 \text{ [K/m}^3]$$

$$f_s = 0,8811$$

$$g_{\text{CO}}^0 = -254689 \text{ [kJ/kmol]}$$

$$g_{\text{H}_2}^0 = -97253 \text{ [kJ/kmol]}$$

$$\text{H}_2 = 0,3838$$

$$\text{H}_2\text{O}_0 = 0,4029$$

$$\text{H}_2\text{O} = 0,3143$$

$$\text{N}_2 = 0,1298$$

$$P_{\text{ref}} = 1 \text{ [bar]}$$

$$T = 700,5 \text{ [K]}$$

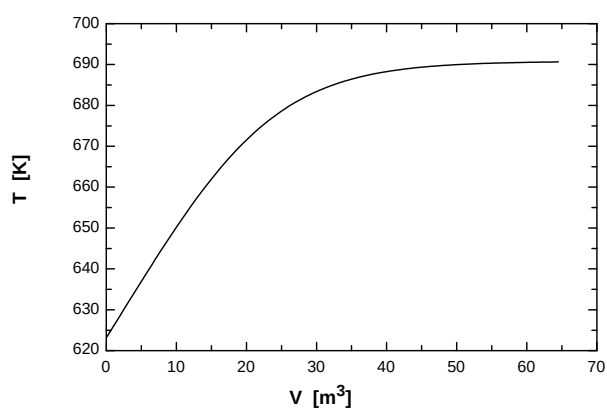
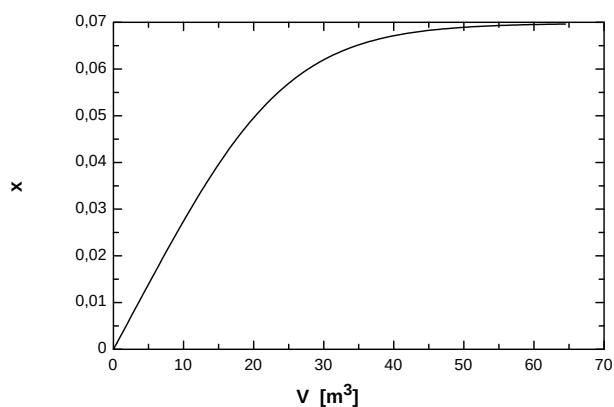
$$T_0 = 623,2 \text{ [K]}$$

$$x = 0,06951$$

No unit problems were detected.

KEY VARIABLES

$$V = 64,5 \text{ [m}^3]$$

**Integral Table**

	V	x	T
Row 1	0	0	623,2
Row 2	0,5	0,001392	624,7
Row 3	1	0,002789	626,3
Row 4	1,5	0,004195	628
Row 5	2	0,005608	629,6
Row 6	2,5	0,007027	631,2
Row 7	3	0,008451	632,8
Row 8	3,5	0,009879	634,4
Row 9	4	0,01131	636,1
Row 10	4,5	0,01275	637,7
Row 11	5	0,01418	639,3
Row 12	5,5	0,01562	640,9
Row 13	6	0,01705	642,6
Row 14	6,5	0,01849	644,2
Row 15	7	0,01992	645,8
Row 16	7,5	0,02134	647,4
Row 17	8	0,02276	649
Row 18	8,5	0,02417	650,6
Row 19	9	0,02557	652,2
Row 20	9,5	0,02697	653,7
Row 21	10	0,02835	655,3
Row 22	10,5	0,02972	656,8
Row 23	11	0,03107	658,3
Row 24	11,5	0,03241	659,8
Row 25	12	0,03373	661,3
Row 26	12,5	0,03504	662,7

Integral Table

	V	x	T
Row 27	13	0,03632	664,2
Row 28	13,5	0,03758	665,6
Row 29	14	0,03882	666,9
Row 30	14,5	0,04004	668,3
Row 31	15	0,04123	669,6
Row 32	15,5	0,04239	670,9
Row 33	16	0,04353	672,2
Row 34	16,5	0,04465	673,4
Row 35	17	0,04573	674,6
Row 36	17,5	0,04678	675,7
Row 37	18	0,04781	676,9
Row 38	18,5	0,04881	678
Row 39	19	0,04977	679
Row 40	19,5	0,05071	680,1
Row 41	20	0,05161	681
Row 42	20,5	0,05247	682
Row 43	21	0,0533	682,9
Row 44	21,5	0,05414	683,8
Row 45	22	0,0549	684,7
Row 46	22,5	0,05565	685,5
Row 47	23	0,05638	686,3
Row 48	23,5	0,05706	687
Row 49	24	0,05773	687,8
Row 50	24,5	0,05836	688,4
Row 51	25	0,05896	689,1
Row 52	25,5	0,05955	689,7
Row 53	26	0,06009	690,3
Row 54	26,5	0,06062	690,9
Row 55	27	0,06112	691,4
Row 56	27,5	0,06159	692
Row 57	28	0,06206	692,5
Row 58	28,5	0,06248	692,9
Row 59	29	0,06289	693,4
Row 60	29,5	0,06328	693,8
Row 61	30	0,06364	694,2
Row 62	30,5	0,064	694,6
Row 63	31	0,06432	694,9
Row 64	31,5	0,06463	695,3
Row 65	32	0,06493	695,6
Row 66	32,5	0,06521	695,9
Row 67	33	0,06547	696,2
Row 68	33,5	0,06571	696,4
Row 69	34	0,06595	696,7
Row 70	34,5	0,06617	696,9
Row 71	35	0,06638	697,1
Row 72	35,5	0,06657	697,3
Row 73	36	0,06675	697,5
Row 74	36,5	0,06693	697,7
Row 75	37	0,06709	697,9
Row 76	37,5	0,06724	698,1
Row 77	38	0,06739	698,2
Row 78	38,5	0,06752	698,4
Row 79	39	0,06765	698,5
Row 80	39,5	0,06777	698,6
Row 81	40	0,06788	698,8
Row 82	40,5	0,06799	698,9

Integral Table

	V	x	T
Row 83	41	0,06809	699
Row 84	41,5	0,06818	699,1
Row 85	42	0,06827	699,2
Row 86	42,5	0,06835	699,3
Row 87	43	0,06843	699,4
Row 88	43,5	0,0685	699,4
Row 89	44	0,06857	699,5
Row 90	44,5	0,06863	699,6
Row 91	45	0,06869	699,6
Row 92	45,5	0,06875	699,7
Row 93	46	0,0688	699,8
Row 94	46,5	0,06885	699,8
Row 95	47	0,06889	699,9
Row 96	47,5	0,06894	699,9
Row 97	48	0,06898	700
Row 98	48,5	0,06901	700
Row 99	49	0,06905	700
Row 100	49,5	0,06908	700,1
Row 101	50	0,06911	700,1
Row 102	50,5	0,06914	700,1
Row 103	51	0,06917	700,2
Row 104	51,5	0,0692	700,2
Row 105	52	0,06922	700,2
Row 106	52,5	0,06924	700,2
Row 107	53	0,06926	700,3
Row 108	53,5	0,06928	700,3
Row 109	54	0,0693	700,3
Row 110	54,5	0,06932	700,3
Row 111	55	0,06934	700,3
Row 112	55,5	0,06935	700,4
Row 113	56	0,06937	700,4
Row 114	56,5	0,06938	700,4
Row 115	57	0,06939	700,4
Row 116	57,5	0,0694	700,4
Row 117	58	0,06941	700,4
Row 118	58,5	0,06942	700,4
Row 119	59	0,06943	700,4
Row 120	59,5	0,06944	700,5
Row 121	60	0,06945	700,5
Row 122	60,5	0,06946	700,5
Row 123	61	0,06947	700,5
Row 124	61,5	0,06947	700,5
Row 125	62	0,06948	700,5
Row 126	62,5	0,06949	700,5
Row 127	63	0,06949	700,5
Row 128	63,5	0,0695	700,5
Row 129	64	0,0695	700,5
Row 130	64,5	0,06951	700,5